

Fundamentos de aprendizagem estatística

Aula 1

Magno Severino
PADS - Modelos Preditivos
23/04/2021

Referências bibliográficas do curso

- **An Introduction to Statistical Learning: with Applications in R.** James, G. and Witten, D. and Hastie, T. and Tibshirani, R. 2013.
- **The Elements of Statistical Learning.** Hastie, T. and Tibshirani, R. and Friedman, J. 2017.
- **R for Data Science** Wickham, H. and Grolemund, G. 2017.
- **Aprendizado de Máquina, uma abordagem estatística.** Izbicki, R. and Santos, T. 2020

Critério de avaliação

- Quiz: 10%
- Listas: 20%
- Atividade integradora: 70%
- Seminário (extra): até 5%

Objetivos de aprendizagem

Ao final dessa aula você deverá ser capaz de

- Diferenciar um problema de regressão e um de classificação.
- Conceituar o que é um modelo estatístico.
- Definir os dois objetivos de modelagem (predição e inferência).
- Compreender o *trade-off* entre interpretabilidade e flexibilidade de um modelo.
- Compreender como mensurar o erro de um modelo.
- Conceituar a decomposição do erro em viés e variância.

Fundamentos de aprendizagem estatística

Modelos
supervisionados

Modelos não
supervisionados

Fundamentos de aprendizagem estatística

Modelos supervisionados

- Regressão linear
- Regressão Logística
- Regularização
- Árvore de Classificação
- Árvore de Regressão
- Bootstrap e Bagging
- Floresta Aleatória
- Boosting

Modelos não supervisionados

- Redução de dimensão
- Escalonamento multidimensional
- Análise de agrupamento
- K-médias
- Text mining

Fundamentos de aprendizagem estatística

Modelos supervisionados

- Regressão linear
- Regressão Logística
- Regularização
- Árvore de Classificação
- Árvore de Regressão
- Bootstrap e Bagging
- Floresta Aleatória
- Boosting

Modelos preditivos

Modelos não supervisionados

- Redução de dimensão
- Escalonamento multidimensional
- Análise de agrupamento
- K-médias
- Text mining

Modelagem preditiva avançada

Fundamentos de aprendizagem estatística

Modelos supervisionados

- Problemas de regressão
- Problemas de classificação

Fundamentos de aprendizagem estatística

Modelos supervisionados

- Problemas de regressão
- Problemas de classificação

Idade	Anos de escolaridade	Salário
28	13	R\$ 6357,70
33	15	R\$ 7035,38
45	11	R\$ 9853,98
⋮	⋮	⋮
40	9	R\$ 1150,76

Fundamentos de aprendizagem estatística

Modelos supervisionados

- Problemas de regressão
- Problemas de classificação

Idade	Anos de escolaridade	Salário
28	13	R\$ 6357,70
33	15	R\$ 7035,38
45	11	R\$ 9853,98
⋮	⋮	⋮
40	9	R\$ 1150,76

Fundamentos de aprendizagem estatística

Modelos supervisionados

- Problemas de regressão

Idade	Anos de escolaridade	Salário
28	13	R\$ 6357,70
33	15	R\$ 7035,38
45	11	R\$ 9853,98
⋮	⋮	⋮
40	9	R\$ 1150,76

- Problemas de classificação

Idade	Salário	Tem graduação
28	R\$ 6357,70	Não
33	R\$ 7035,38	Sim
45	R\$ 9853,98	Sim
⋮	⋮	⋮
40	R\$ 1150,76	Não

Fundamentos de aprendizagem estatística

Modelos supervisionados

- Problemas de regressão

Idade	Anos de escolaridade	Salário
28	13	R\$ 6357,70
33	15	R\$ 7035,38
45	11	R\$ 9853,98
⋮	⋮	⋮
40	9	R\$ 1150,76

- Problemas de classificação

Idade	Salário	Tem graduação
28	R\$ 6357,70	Não
33	R\$ 7035,38	Sim
45	R\$ 9853,98	Sim
⋮	⋮	⋮
40	R\$ 1150,76	Não

Fundamentos de aprendizagem estatística

Modelos supervisionados

- Problemas de regressão

Idade	Anos de escolaridade	Salário
28	13	R\$ 6357,70
33	15	R\$ 7035,38
45	11	R\$ 9853,98
⋮	⋮	⋮
40	9	R\$ 1150,76

- Problemas de classificação

Idade	Salário	Tem graduação
28	R\$ 6357,70	Não
33	R\$ 7035,38	Sim
45	R\$ 9853,98	Sim
⋮	⋮	⋮
40	R\$ 1150,76	Não

Regularização

Regressão linear

Bootstrap e Bagging

Regressão Logística

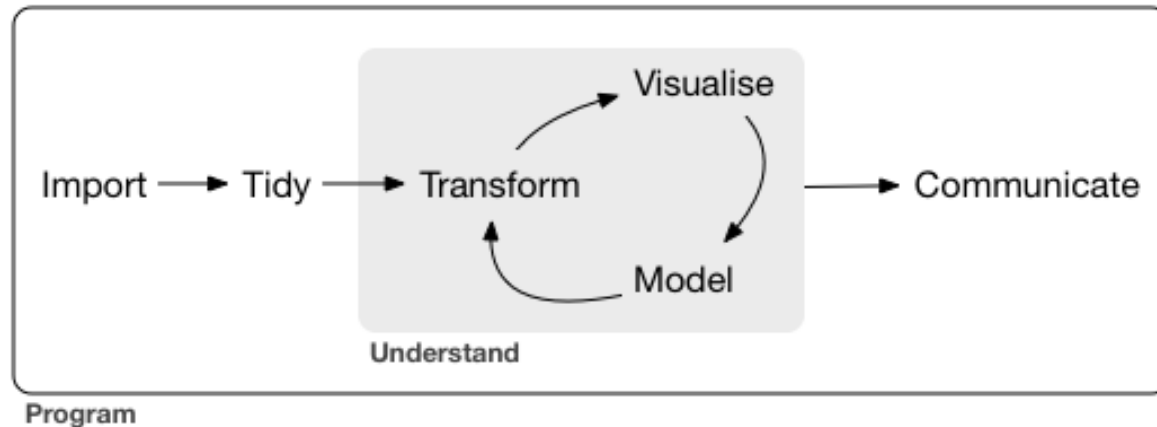
Árvore de Regressão

Floresta Aleatória

Árvore de Classificação

Boosting

Fundamentos de aprendizagem estatística



[1] Fonte: livro **R for Data Science** Wickham, H. and Grolemund, G. 2017.

Caso: *advertising*¹

[1] Fonte: livro *An Introduction to Statistical Learning with Applications in R*.

Caso: *advertising*¹

Como cientista de dados, você deve fornecer ideias sobre como estimar as vendas de um determinado produto baseado no total investido em mídia (jornal, rádio e TV).

Para isso, foram coletados o total de vendas e o valor investido em cada uma das mídias consideradas em 200 mercados diferentes.

	TV ↕	radio ↕	newspaper ↕	sales ↕
1	230.1	37.8	69.2	22.1
2	44.5	39.3	45.1	10.4
3	17.2	45.9	69.3	9.3
4	151.5	41.3	58.5	18.5
5	180.8	10.8	58.4	12.9

Showing 1 to 5 of 200 entries

Previous

1

2

3

4

5

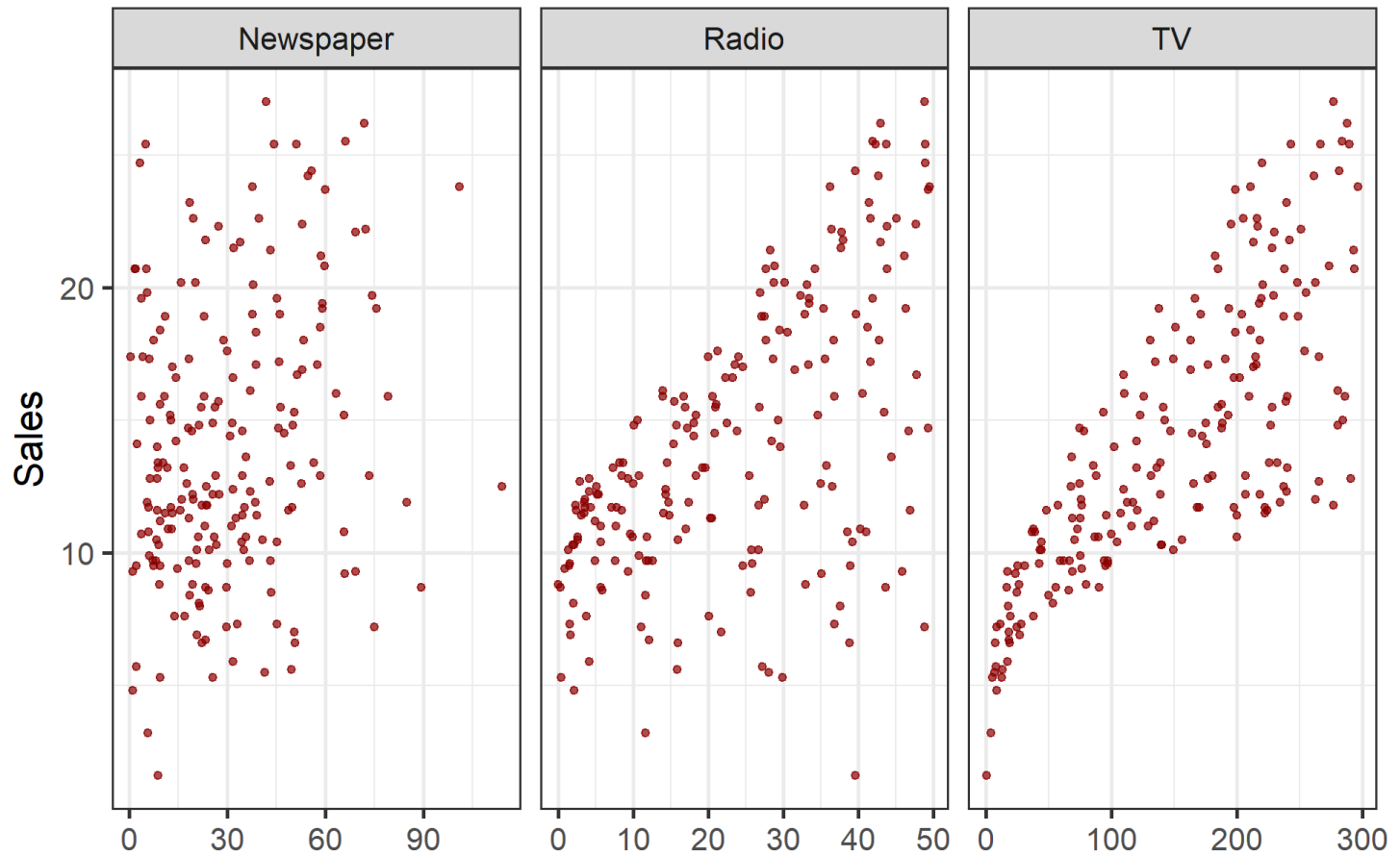
...

40

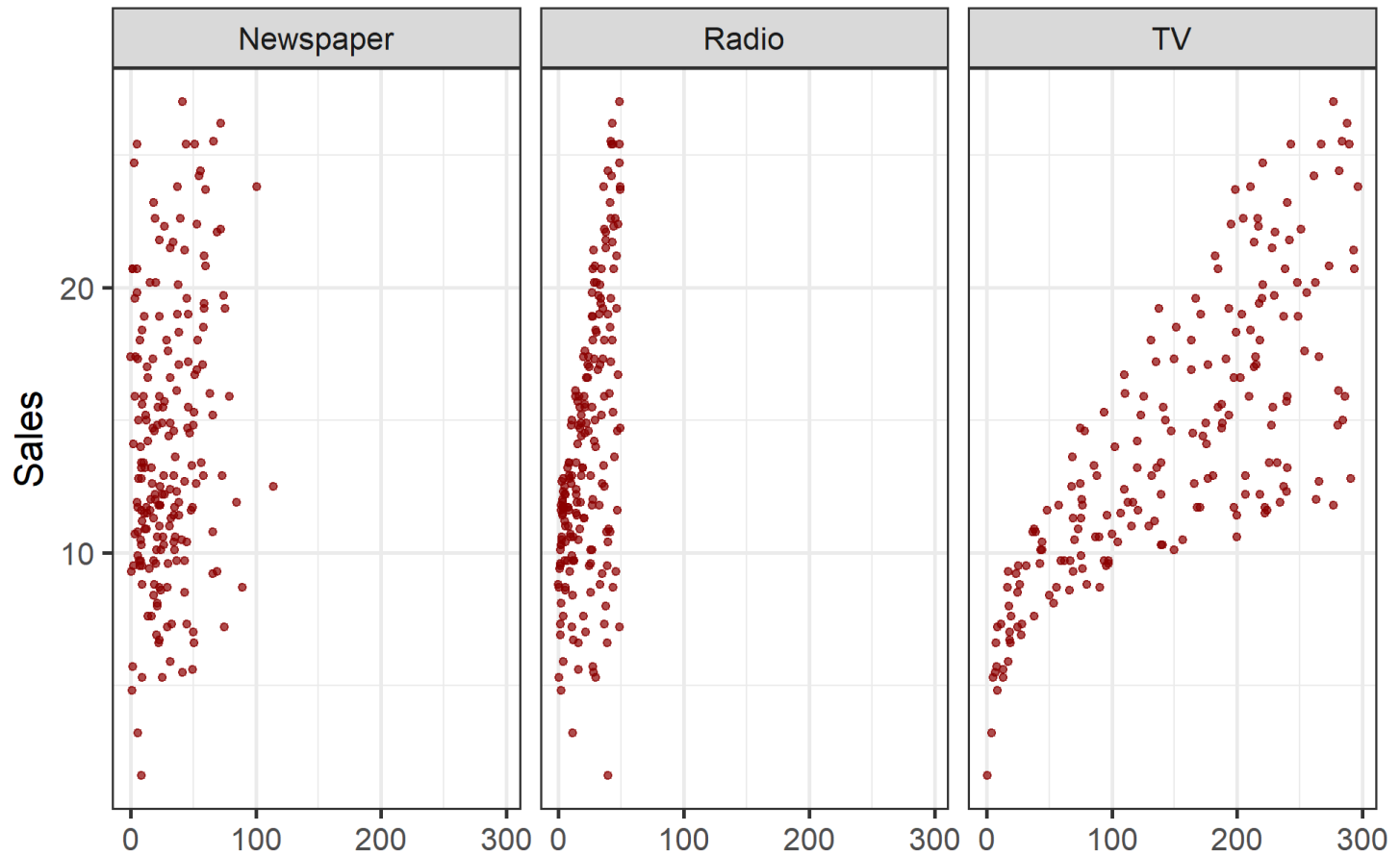
Next

[1] Fonte: livro *An Introduction to Statistical Learning with Applications in R*.

Visualização dos dados



Visualização dos dados



Um pouco de nomenclatura e notação

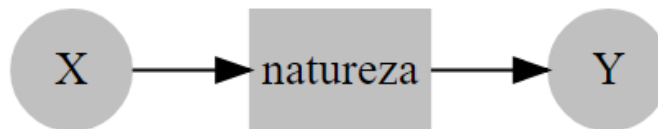
- **sales**: variável resposta, variável dependente, *target*, *output*.
 - Geralmente é denotada por Y .
- **newspaper**, **radio**, **TV**: variáveis explicativas, variáveis independentes, variáveis preditoras, *inputs*, *features*.
 - Geralmente são denotadas por X , com um subscrito para distinguí-las.
 - Por exemplo, X_1 para newspaper, X_2 para radio e X_3 para TV.

Estudando a relação entre variáveis

Assumimos que existe uma relação entre as preditoras, X_1, X_2, X_3 (jornal, rádio e TV), e a resposta que pode ser escrita da seguinte forma

$$Y = f(X_1, X_2, X_3) + \epsilon,$$

em que f é uma função desconhecida das preditoras e ϵ é um erro aleatório que é independente de $X = (X_1, X_2, X_3)$ com média zero.



Quando Y é uma variável quantitativa, dizemos que estamos tratando de um problema de **regressão**.

Notação

Observação	newspaper	radio	TV	sales
1	69,2	37,8	230,0	22,1
2	45,1	39,3	44,5	10,4
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
200	8,7	8,6	232,0	13,4

Observação	X_1	X_2	X_3	Y
1	X_{11}	X_{12}	X_{13}	Y_1
2	X_{21}	X_{22}	X_{23}	Y_2
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
200	$X_{200;1}$	$X_{200;2}$	$X_{200;3}$	Y_{200}

Notação geral

Observação	X_1	X_2	\dots	X_p	Y
1	X_{11}	X_{12}	\dots	X_{1p}	Y_1
2	X_{21}	X_{22}	\dots	X_{2p}	Y_2
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
n	X_{n1}	X_{n2}	\dots	X_{np}	Y_n

O conjunto das p preditoras pode ser representado por $X = (X_1, X_2, \dots, X_p)$.

X_j é a preditora j .

X_{ij} é o valor da preditora j na i -ésima observação.

Generalizando

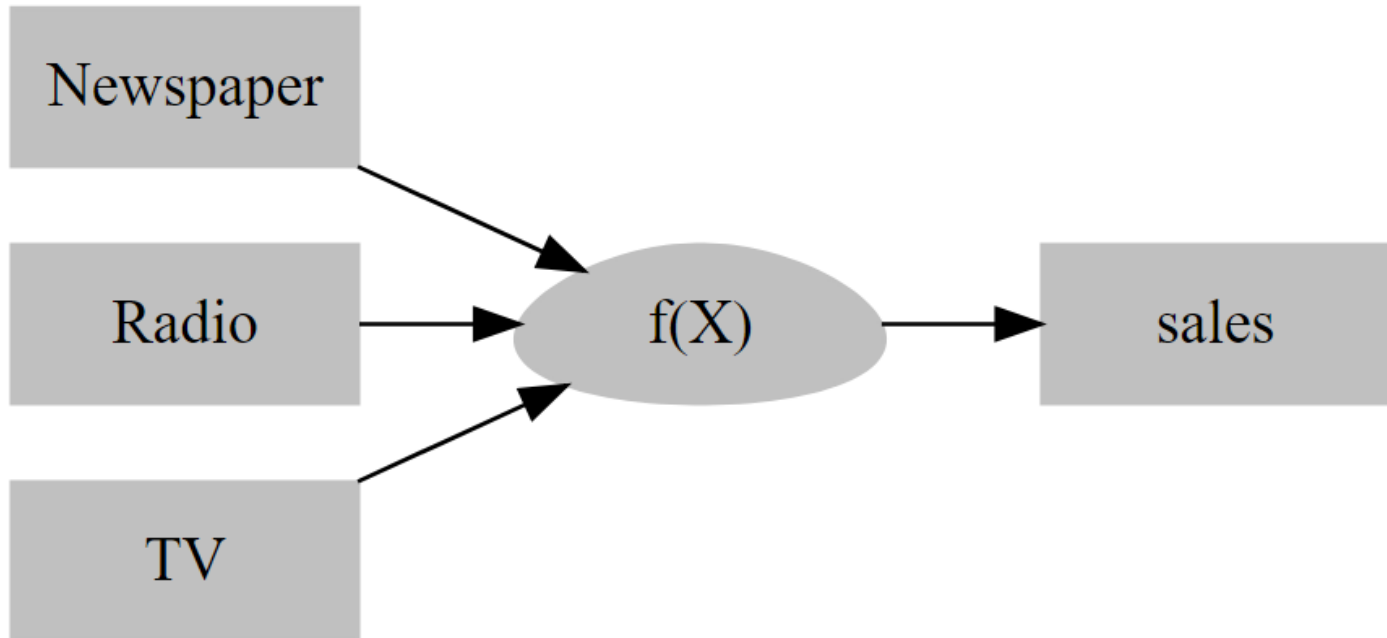
Considere que seja observada uma variável quantitativa Y e p preditoras $X = (X_1, X_2, \dots, X_p)$.

Assumimos que existe uma relação entre essas medidas que pode ser escrita de forma geral como

$$Y = f(X) + \epsilon,$$

Note que f representa a informação sistemática que X fornece de Y .

Novamente, ϵ é um erro aleatório que é independente de X com média zero. Ele representa fatores que afetam Y , mas não estão relacionados aos valores das preditoras X .



Porque estimar f ?

Existem duas principais razões: *predição e inferência.*

Inferência

O interesse está centrado em entender como Y varia de acordo com os valores de (X_1, \dots, X_p) :

- Quais variáveis (X_j) estão associadas com a resposta (Y) ?
- Qual a relação entre a resposta (Y) e cada preditora?
- A relação entre Y e cada preditora pode ser representada adequadamente usando uma equação linear, ou é uma relação mais complicada?

Caso: *advertising*

- Qual mídia contribui para o total vendas?
- Qual mídia gera o maior aumento no total vendas?
- Qual o aumento esperado no total de vendas dado um acréscimo no investimento de propaganda em TV?

Predição

- Em algumas situações, queremos apenas estimar o valor de Y dadas as variáveis preditoras (X_1, \dots, X_p) .
- Estimativa para f : \hat{f} .
- Nesse caso, trata-se a função preditora \hat{f} como uma caixa preta.
- Não há interesse particular na forma de \hat{f} , desde que ela gere boas previsões para Y .
- **Este é o foco deste curso.**

Caso: *advertising*

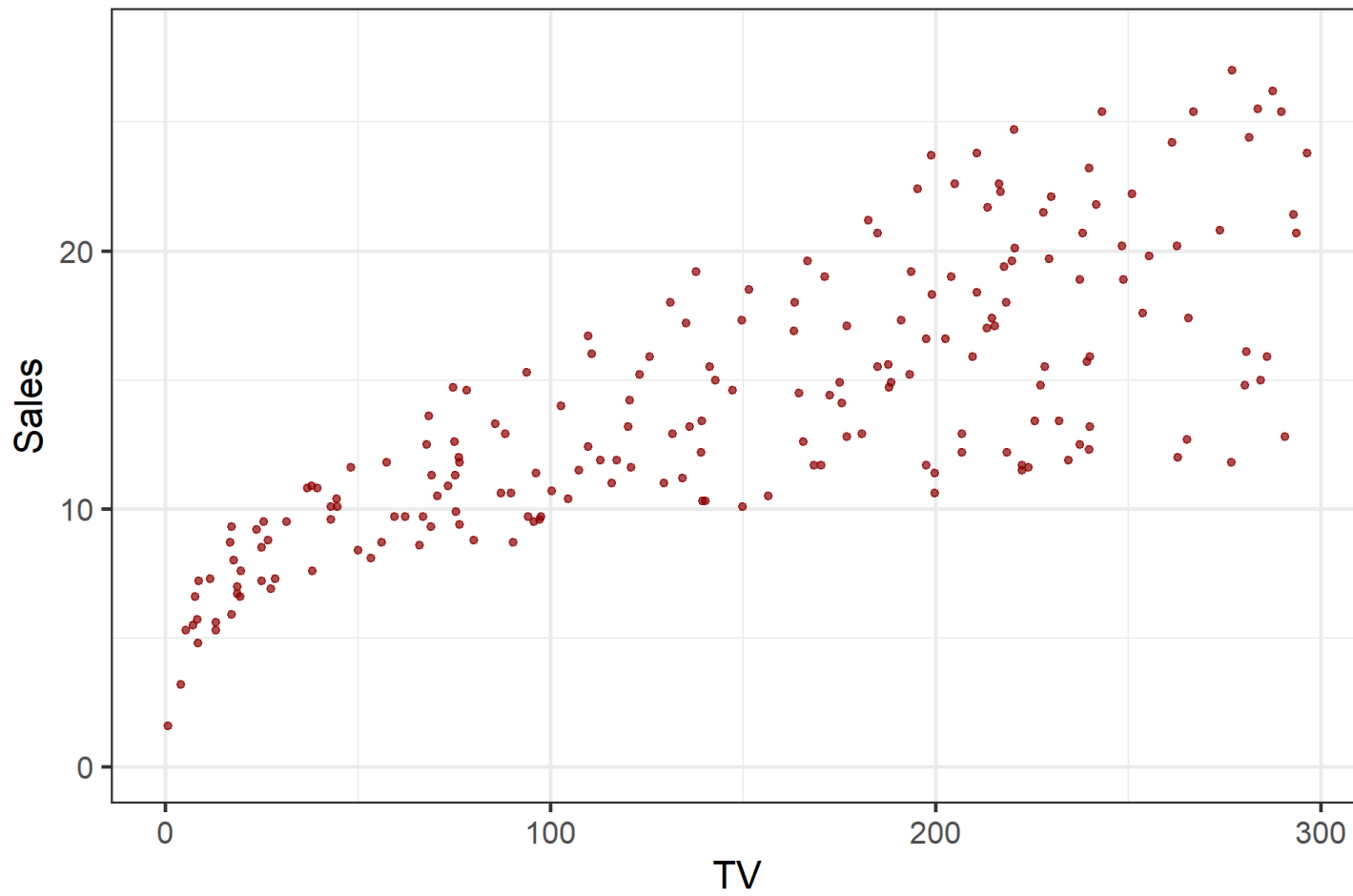
- Qual o total de vendas previsto para um produto em que foi investido 32,0 em newspaper, 24,3 em radio e 142,5 em TV?

Como estimar f ?

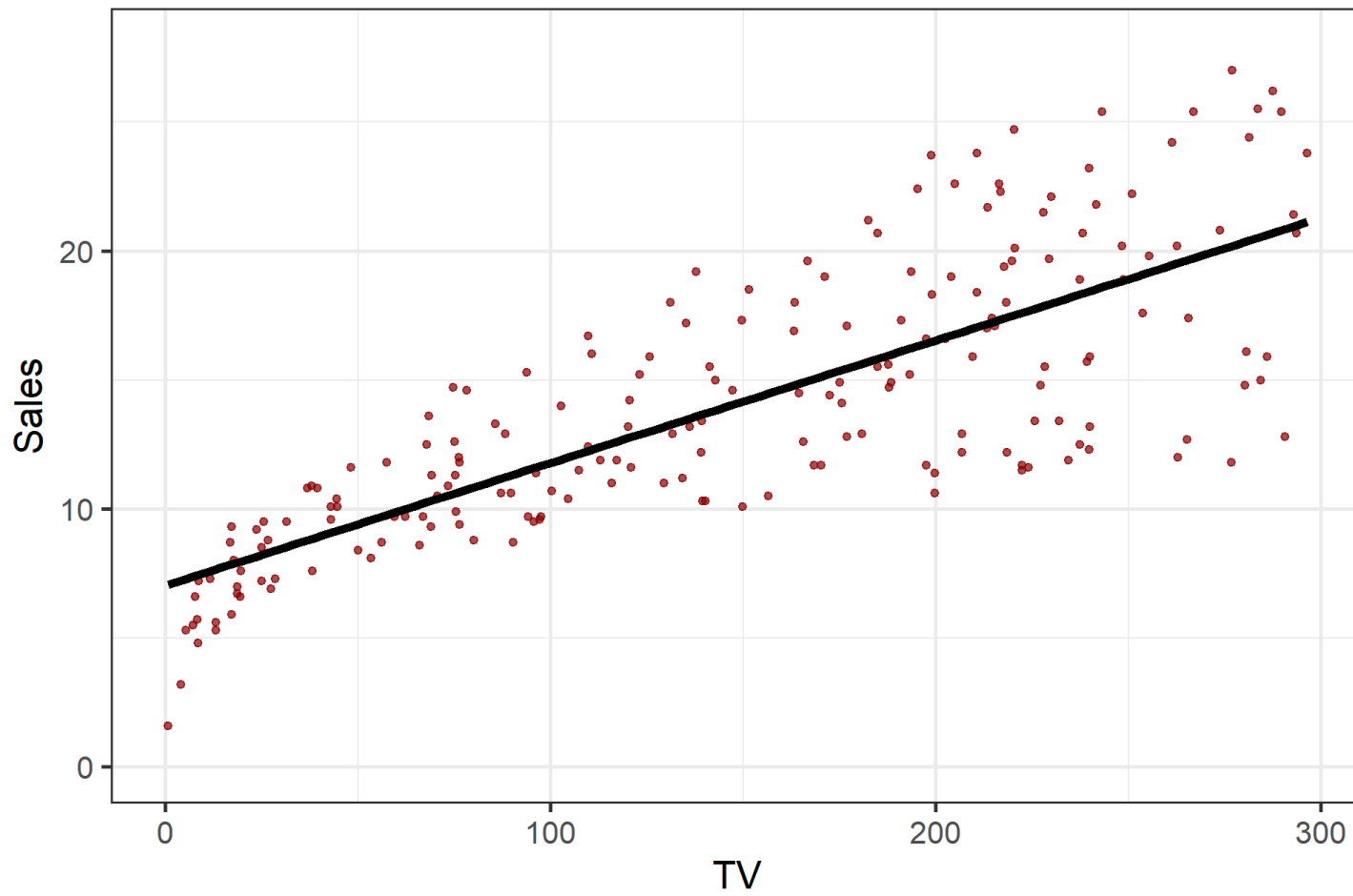
- Considere que foi observado um conjunto de dados tamanho n .
- Essas observações são chamadas de **conjunto de treino/treinamento**, pois serão usadas para treinar o modelo para estimar f .
- Seja $x_i = (x_{i1}, \dots, x_{ip})$ o vetor que apresenta os valores das p preditoras na observação i .
- Dados de treino: $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)$.
- No caso *advertising*, $n = 200$ e $p = 3$.
- Aprendizagem **supervisionada** (quando Y é conhecido).
- Ideia: utilizar a informação contida nos dados de treinamento para construir uma função \hat{f} , que será nossa estimativa para f , e assim prever

$$\hat{Y} = \hat{f}(X).$$

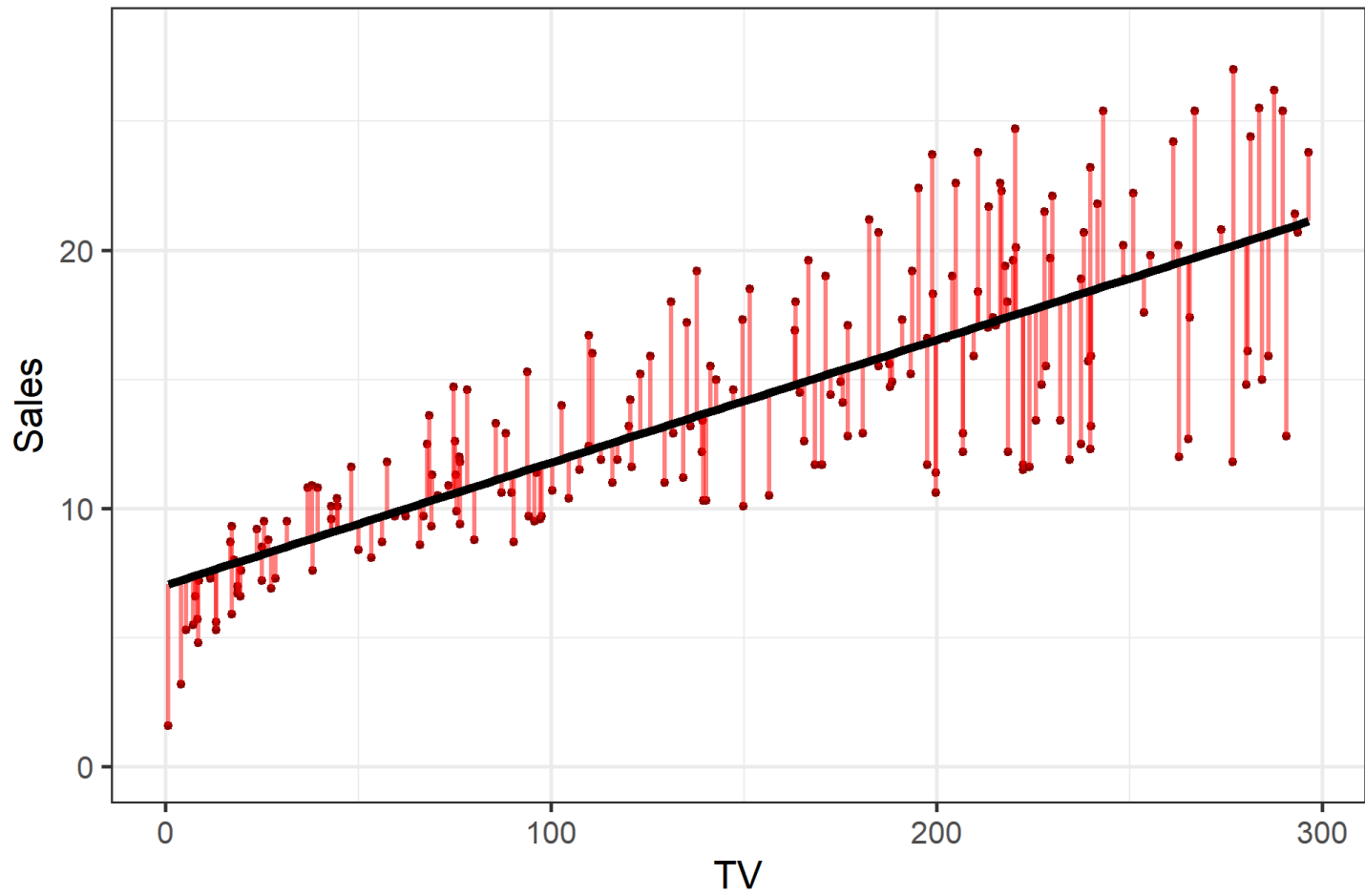
Visualização dos dados



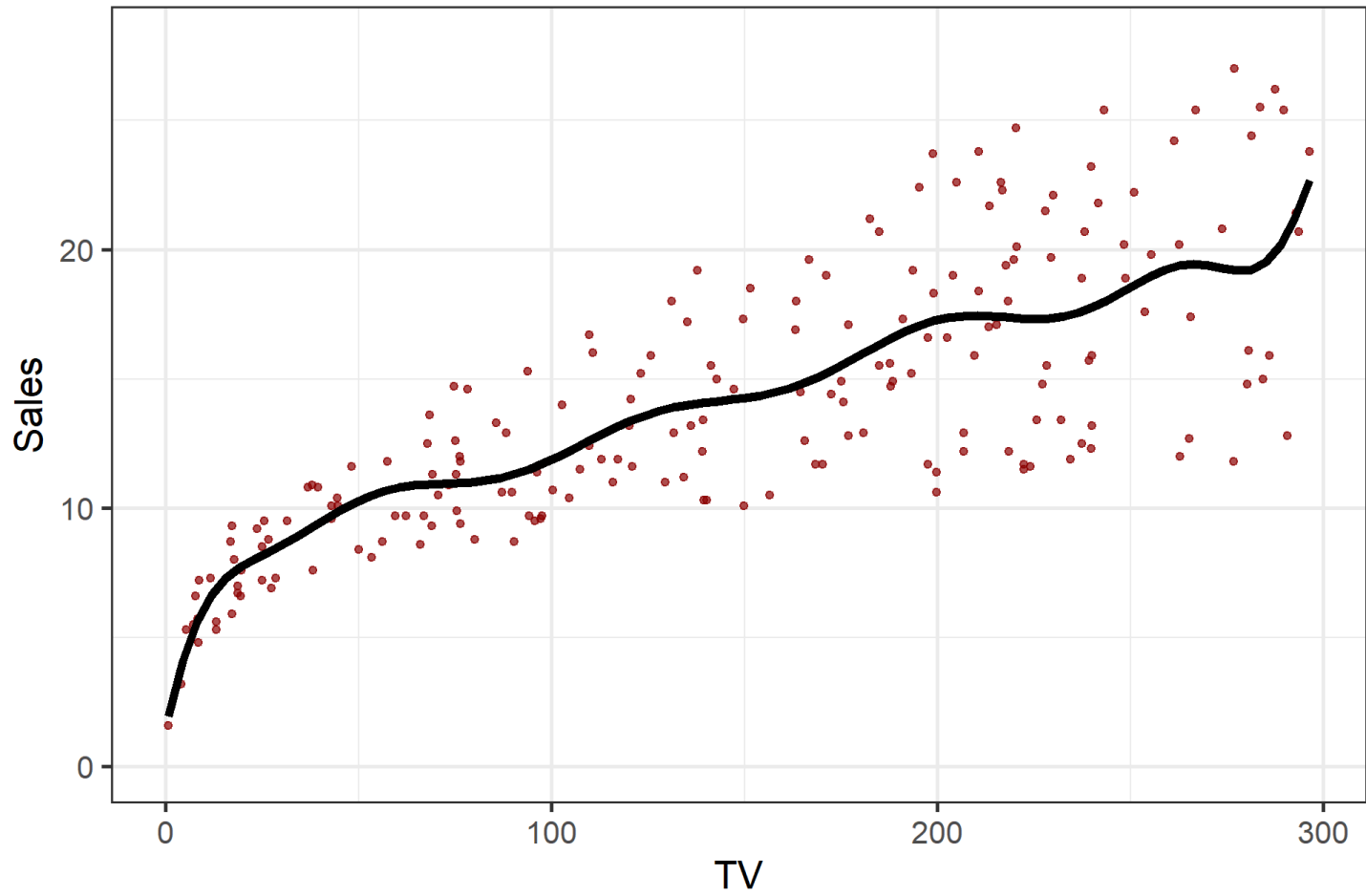
Modelo linear



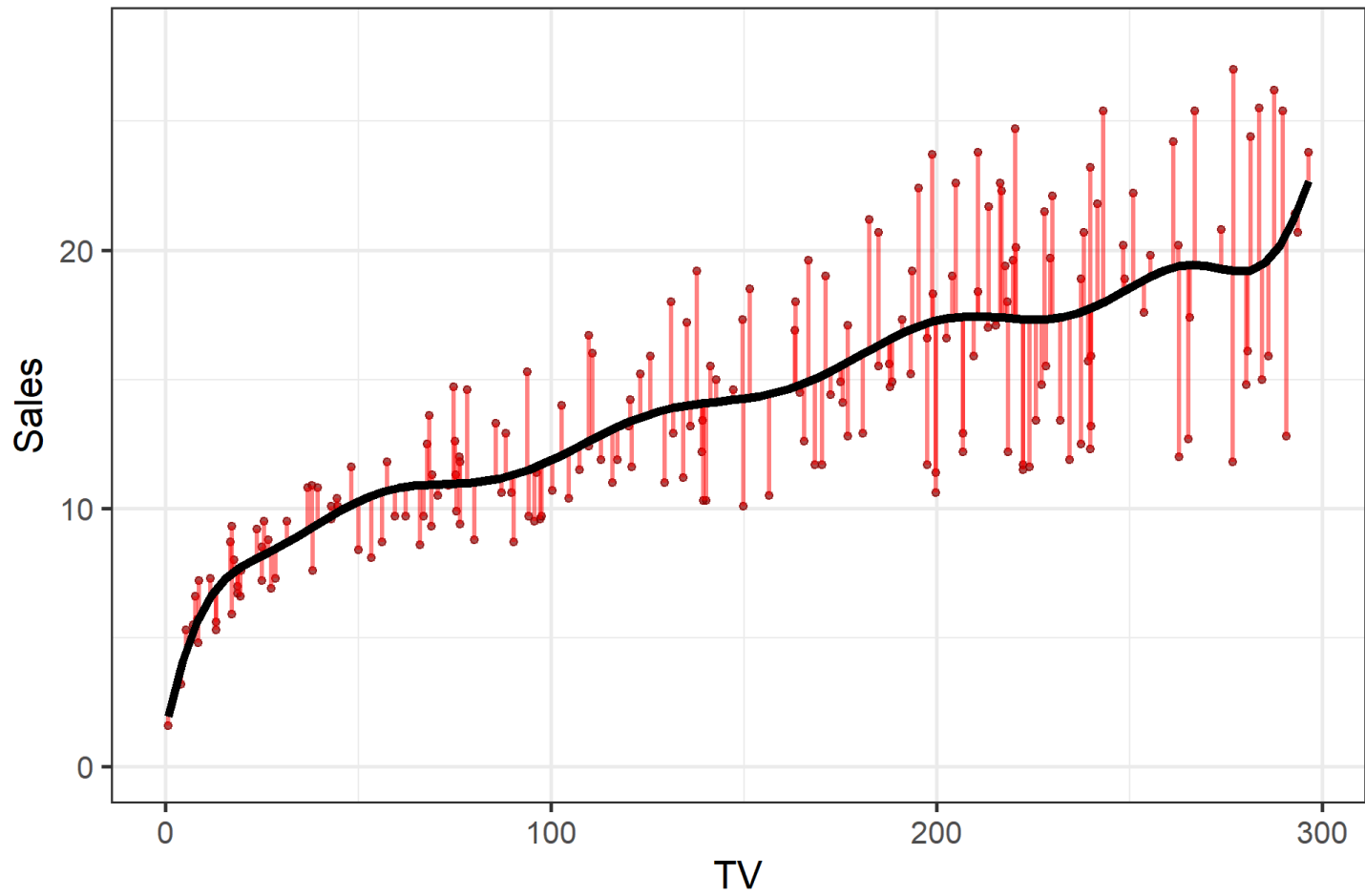
Modelo linear



Modelo polinomial



Modelo polinomial



Erro redutível e irreduzível

- Em geral, \hat{f} não é uma estimativa perfeita para f , essa "imperfeição" produz um erro:

$$Y - \hat{Y} \neq 0.$$

- Esse erro é *redutível*, pois pode-se melhorar a acurácia de \hat{f} utilizando um modelo mais apropriado para aprender sobre f .
- Lembre que

$$Y = f(X) + \epsilon,$$

ou seja, Y também é uma função de ϵ , que não pode ser predito através de X .

- A variabilidade associada ao ϵ afeta a acurácia das predições.
- Esse erro é conhecido como erro *irreduzível*.
- Considere uma \hat{f} e um conjunto de preditoras X . Se fixarmos \hat{f} e X , então

$$\begin{aligned} E(Y - \hat{Y})^2 &= E(f(X) + \epsilon - \hat{f}(X))^2 \\ &= \underbrace{[f(X) - \hat{f}(X)]^2}_{\text{redutível}} + \underbrace{\text{Var}(\epsilon)}_{\text{irreduzível}}. \end{aligned}$$

Formas de estimar f

Modelos paramétricos

1. Assume-se a forma de f . Por exemplo, que f é linear:

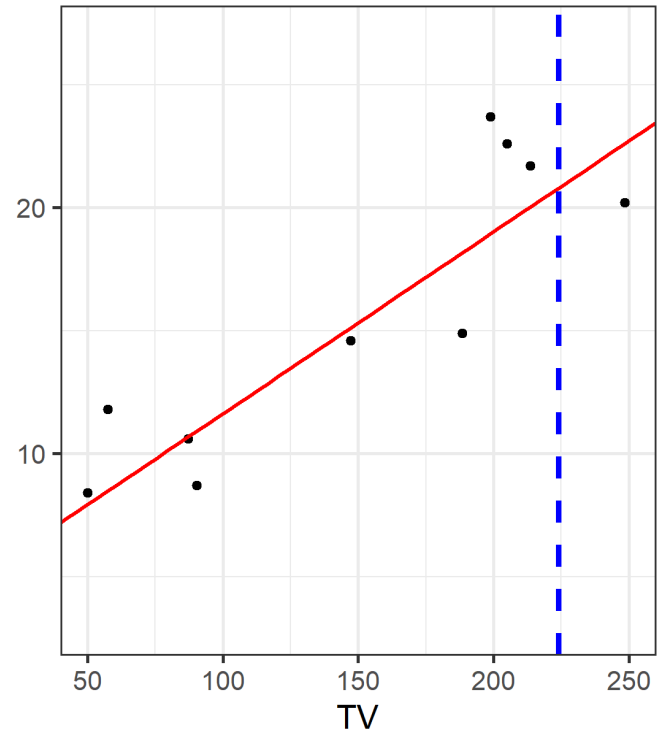
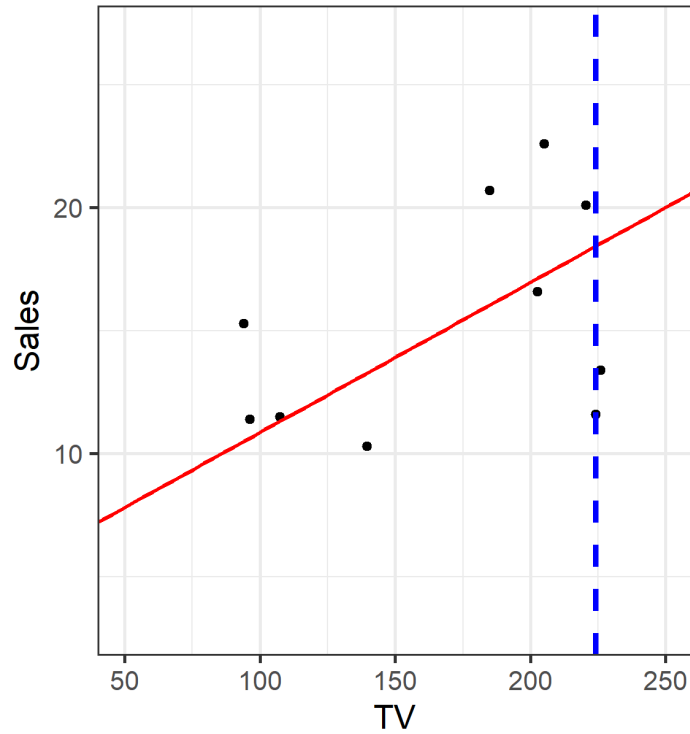
$$f(X) = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \cdots + \beta_p X_p$$

2. Agora o problema é estimar os coeficientes $\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_p$ a partir do conjunto de treinamento.

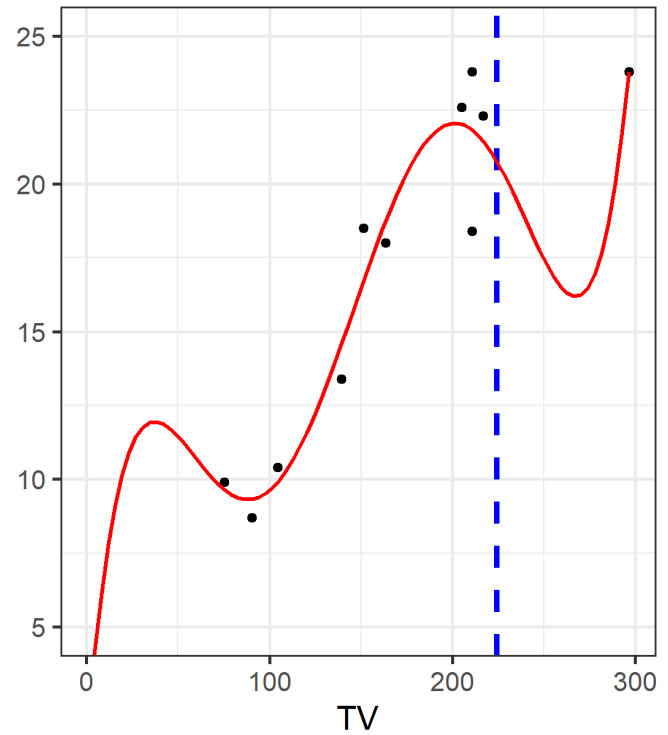
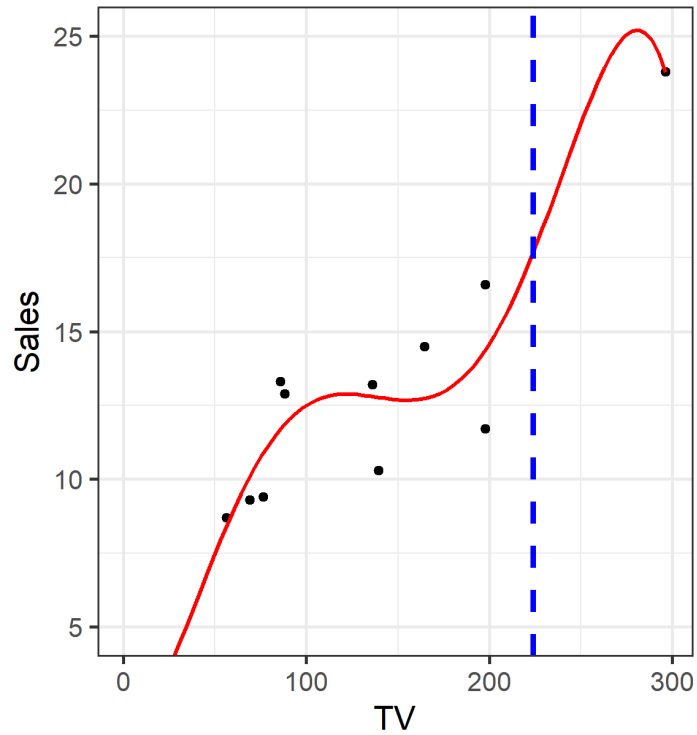
Modelos não-paramétricos

- Não assume nenhuma forma para a função f .
- Busca uma função que seja o mais próximo possível dos pontos no conjunto de treinamento.

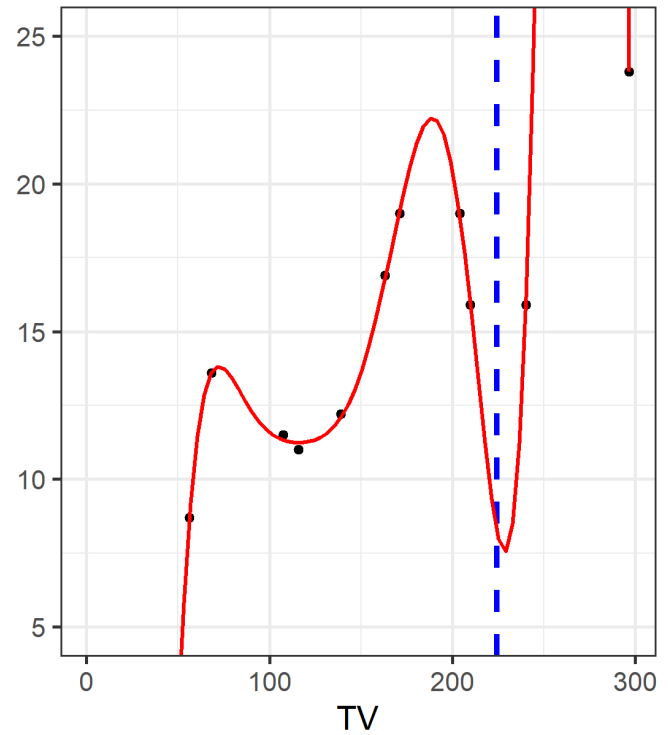
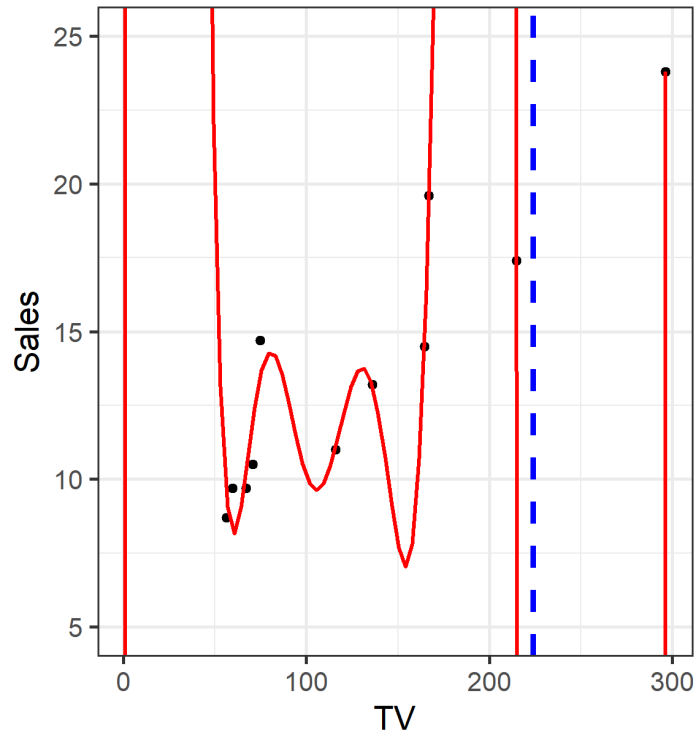
Modelo menos flexível



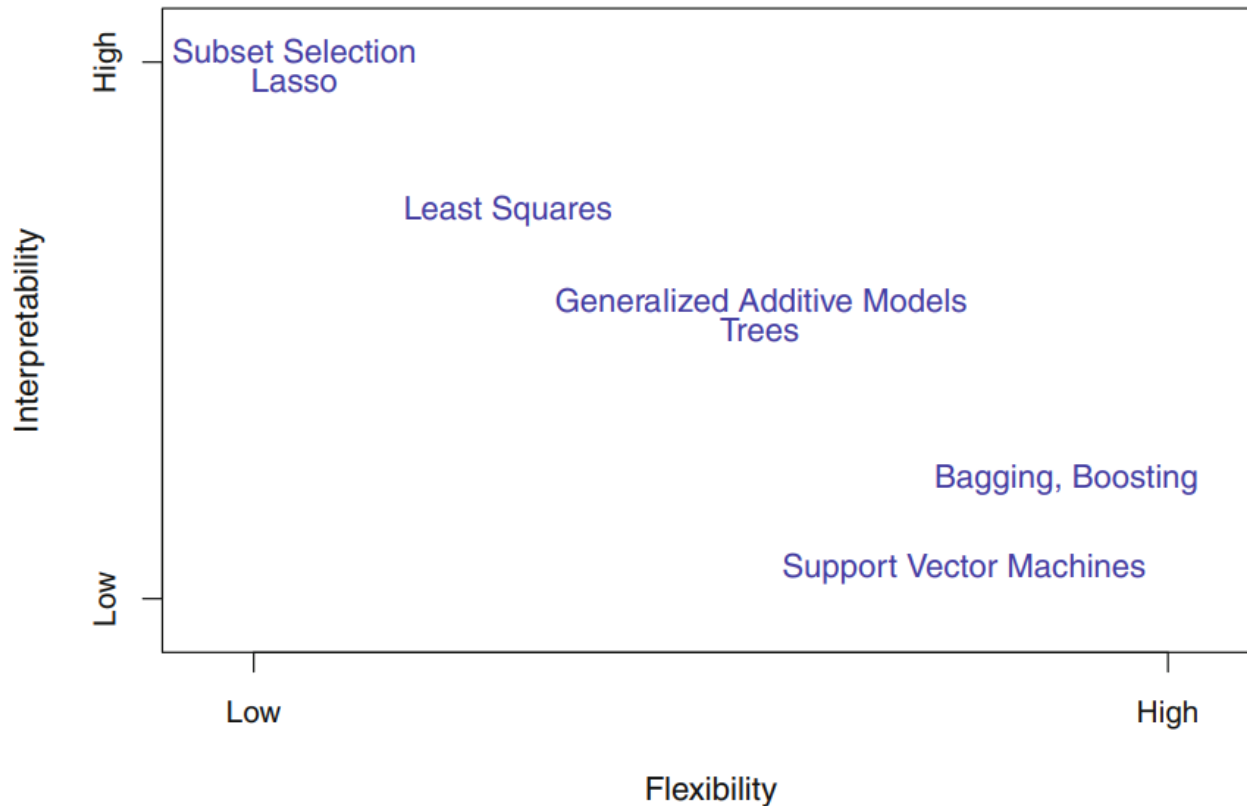
Modelo mais flexível



Modelo muito flexível



Relação entre interpretabilidade e flexibilidade



[1] Figura: pág. 25 de [An Introduction to Statistical Learning with Applications in R](#).

Resumindo...

- Definição de variável resposta Y e variáveis preditoras $X = (X_1, \dots, X_p)$.
- Quando Y é quantitativa, dizemos estar tratando de um problema de **regressão**.
- Modelo: $Y = f(X) + \epsilon$, f é desconhecida.
- Queremos estimar f para fazer **inferência** ou **predição**.
- Estimativa de f : \hat{f} .
- O erro de \hat{f} pode ser decomposto em
 - erro **redutível**: $[f(X) - \hat{f}(X)]^2$,
 - erro **irredutível**: $\text{Var}(\epsilon)$.
- Relação entre interpretabilidade e flexibilidade.

Proximo passo: prática em R

```
library(tidyverse)

dados <- read_csv("Advertising.csv")

dados %>%
  ggplot(aes(x=TV, y=sales)) +
  geom_point(col="darkred")+
  labs(y="Sales", x="TV")

dados %>%
  ggplot(aes(x=radio, y=sales)) +
  geom_point(col="darkred")+
  labs(y="Sales", x="Radio")

dados %>%
  ggplot(aes(x=newspaper, y=sales)) +
  geom_point(col="darkred")+
  labs(y="Sales", x="Newspaper")

fit_lm <- lm(sales ~ ., data=dados)

pred <- predict(fit_lm)
```

Avaliando a qualidade do ajuste

- Precisamos de uma maneira de medir a performance de um método de aprendizagem estatística.
- Quão boas as previsões são em relação aos dados observados?
- No contexto de regressão, a medida mais utilizada é o *erro quadrático médio* (MSE - *mean squared error*):

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{f}(x_i))^2.$$

- $\hat{f}(x_i)$ é a previsão que \hat{f} dá para a i -ésima observação.
- MSE vai ser pequeno se as previsões forem próximas dos valores verdadeiros.
- **MSE de treino**: calculado com as observações do conjunto de treino/treinamento.

Valor esperado

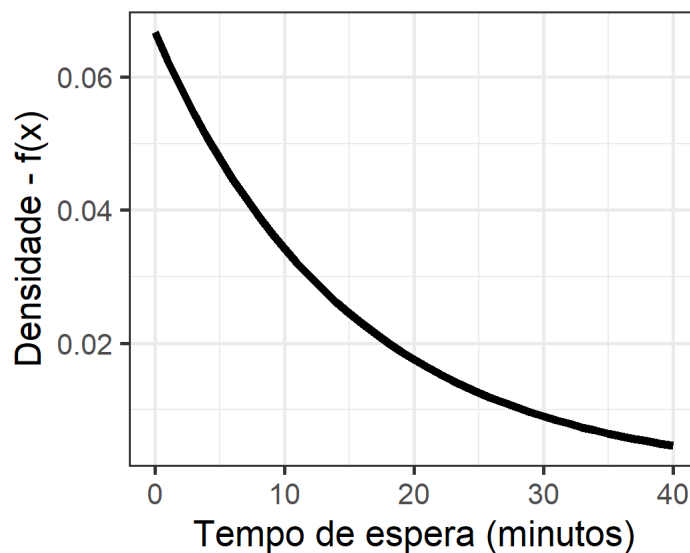
- Variável aleatória discreta

prêmio	$P(\text{prêmio})$
50	0,7
100	0,2
200	0,1

$$E(\text{premio}) = 50 \times 0,7 + 100 \times 0,2 + 200 \times 0,1.$$

Valor esperado

- Variável aleatória contínua: o tempo de espera em uma estação de metrô segue uma distribuição exponencial com média de 15 minutos. $X \sim \text{Exp}(\lambda = 1/15)$.



$$E(X) = \int_0^{\infty} x f(x) dx = 15.$$

Erro de predição esperado

- Em termos matemáticos, o erro de predição esperado é dado por

$$E[(Y - f(x))^2].$$

- Objetivo: encontrar uma função $g : \mathbb{R}^p \rightarrow \mathbb{R}$ que minimize o erro de predição.
- Suponha que $(X, Y) \sim F_{X,Y}$.
- $E[(Y - f(x))^2] = \int (y - f(x))^2 dF_{X,Y}(x, y)$.
- Utilizando as propriedades da esperança condicional, podemos reescrever a expressão acima

$$\begin{aligned} E[(Y - f(x))^2] &= E[E[(Y - f(x))^2 | X]] \\ &= \int E[(Y - f(x))^2 | X = x] dF_X(x). \end{aligned}$$

- Então, basta encontrar f que minimize o integrando $E[(Y - f(x))^2 | X = x]$.

- **Minimizar** $E[(Y - f(x))^2|X = x]$.
- Desenvolvendo o produto notável do tipo $(a + b)^2$, temos:

$$\begin{aligned} E[(Y - f(x))^2|X = x] &= E[Y^2 - 2Yf(x) + f^2(x)|X = x] \\ &= E[Y|X = x] - 2f(x)E[Y|X = x] + f^2(x). \end{aligned}$$

- Derivando em relação à $f(x)$ e igualando a zero:

$$-2E[Y|X = x] + 2f(x) = 0.$$

- Logo, a função f que minimiza o erro de predição esperado é a função de regressão

$$f(x) = E[Y|X = x].$$

- Problema?
- Na prática, trabalhamos com amostras e não sabemos a distribuição $F_{X,Y}$!

E agora?

- A solução de $E[Y|X = x]$ depende de quantidades desconhecidas, $F_{X,Y}$.
- Entretanto, uma boa estimativa para $E[Y|X = x]$ nos fornecerá um bom preditor para Y .
- Considere uma amostra $(X_1, Y_1), (X_2, Y_2), \dots, (X_n, Y_n)$ dos dados.
- **Ideia central da aprendizagem estatística:** utilizar a informação contida na amostra para construir uma função $\hat{f} : \mathbb{R}^p \rightarrow \mathbb{R}$ que será a estimativa para f .

Revisando

- Lembre-se que estamos considerando o modelo aditivo

$$Y = f(X) + \epsilon,$$

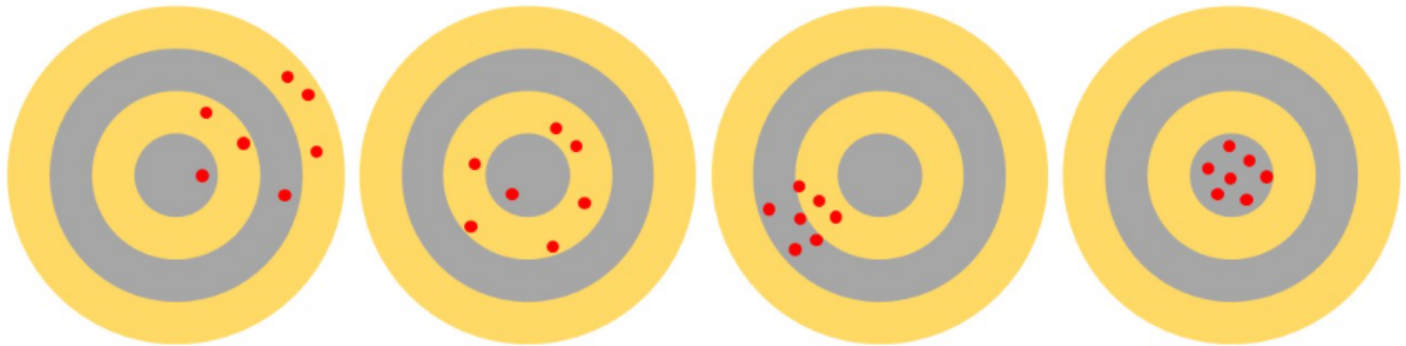
em que X é o vetor de preditoras, com distribuição F_X e o erro aleatório ϵ tem média 0, variância σ^2 e é independente de X .

- A utilização do modelo aditivo nos permite decompor o erro de predição esperado $E[(Y - \hat{f}(X))^2]$ em fatores interpretáveis: **erro redutível** e **erro irredutível**.
- Além disso, ele pode ser escrito como

$$\begin{aligned} E[(Y - \hat{f}(x))^2] &= E[E[(Y - \hat{f}(x))^2|X]] \\ &= \int E[(Y - \hat{f}(x))^2|X = x]dF_X(x). \end{aligned}$$

Relação entre viés e variância

- $\text{Var}(\theta) = E(\theta^2) - E^2(\theta)$;
- $\text{Viés}(\theta) = E(\hat{\theta}) - \theta$;
- $\text{MSE}(\hat{\theta}) = E[(\hat{\theta} - \theta)^2] = \text{Viés}^2(\theta) + \text{Var}(\hat{\theta})$.



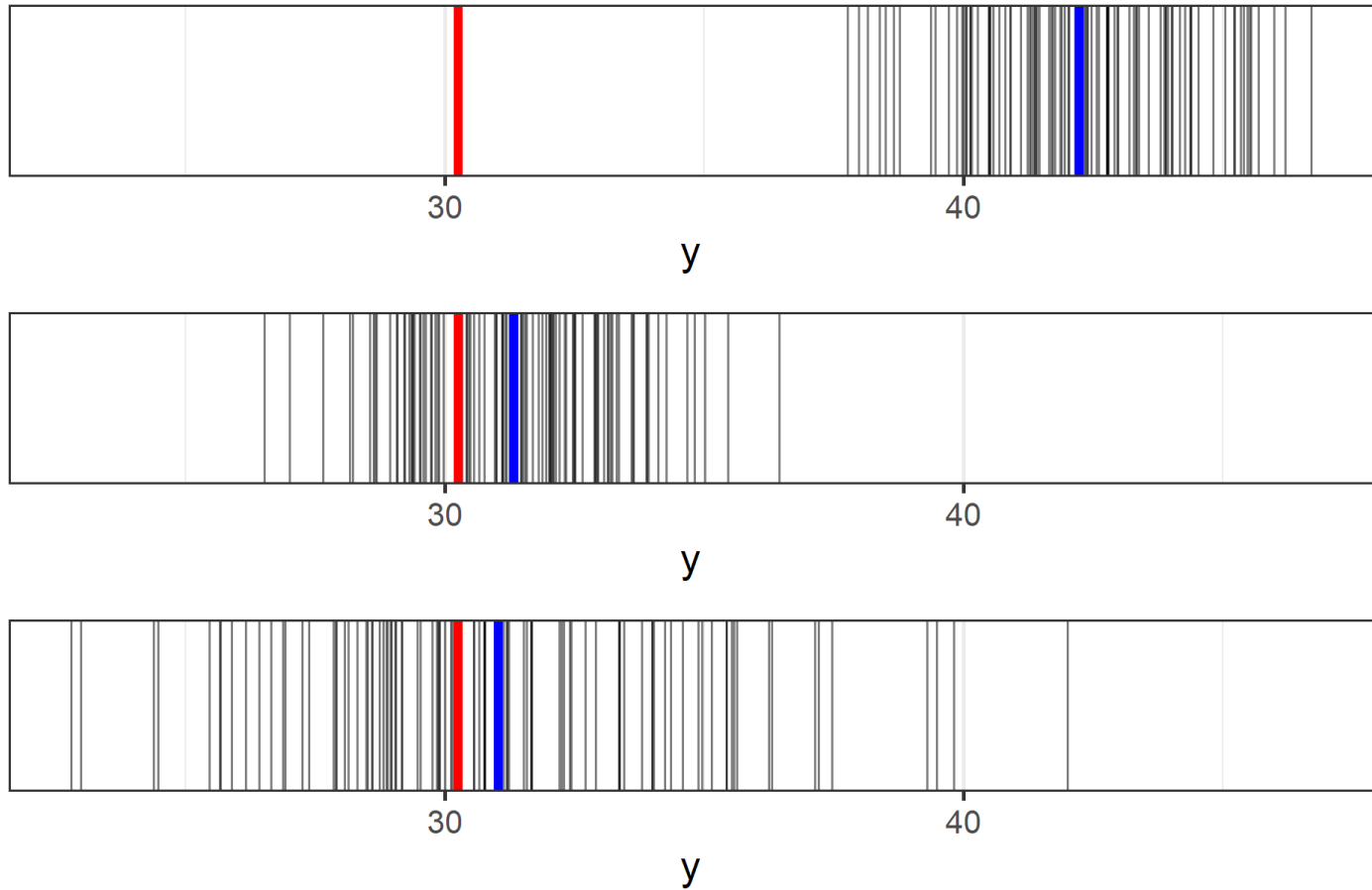
Decomposição do erro em viés e variância

- Podemos decompor $E[(Y - \hat{f}(X))^2]$ em termos de viés e variância:

$$\begin{aligned} E[(Y - \hat{f}(x))^2] &= \int (\text{Vies}^2(\hat{f}(x)) + \text{Var}(\hat{f}(x))) dF_X(x) + \sigma^2 \\ &= \int \text{MSE}[\hat{f}(x)] dF_X(x) + \sigma^2. \end{aligned}$$

- O resultado acima nos diz que para minimizar o erro de predição esperado, temos que selecionar um método de aprendizagem estatística que tenha baixo viés e baixa variância simultaneamente.

Viés e variância em três cenários



Trade-off entre viés e variância

- Dados de treinamento são usados para estimar f .
- Diferentes conjuntos de dados de treinamento geram \hat{f} distintas.
- Idealmente, \hat{f} não deve variar tanto ao usar um conjunto de treinamento diferente.
- Decomposição do erro:

$$\text{MSE}[\hat{f}(x)] = \text{Vies}^2[\hat{f}(x)] + \text{Var}[\hat{f}(x)]$$

- A **variância** de um método de aprendizagem estatística mede o quanto a estimativa \hat{f} muda conforme treinamos o modelo com novos dados de treinamento.
- O **viés** de um método de aprendizagem mede o quanto \hat{f} difere em média de f sob replicação do processo de aprendizagem.
- Em geral, modelos mais flexíveis apresentam alta variância e baixo viés.
- **Trade-off**: é fácil diminuir o viés do aprendizado aumentando a sua variância (e vice-versa).

Simulação

- Estamos interessados em prever a renda anual Y de uma pessoa que possui x anos de escolaridade.
- Considere que a função que relaciona anos de escolaridade com a renda anual é

$$Y = f(x) = 45 \times \tanh\left(\frac{x}{1,9} - 7\right) + 57.$$

Geração de dados

- Vamos considerar pessoas com anos de estudo distribuídos uniformemente entre 8 e 18, ou seja, $X \sim U(8, 18)$.

- Para simular a realidade, adicionamos um erro:

$$Y = f(x) + \sigma^2.$$

- O erro aleatório σ^2 segue uma distribuição normal com média 0 e desvio padrão 4, ou seja, $\sigma^2 \sim N(0, 4^2)$.
- Objetivo: avaliar o modelo para previsão Y quando $x = 10$.
- $f(10) = 14,7$.

Como fazer no R?

```
n_obs <- 30

valor_x <- runif(n = n_obs, min = 8, max = 18)

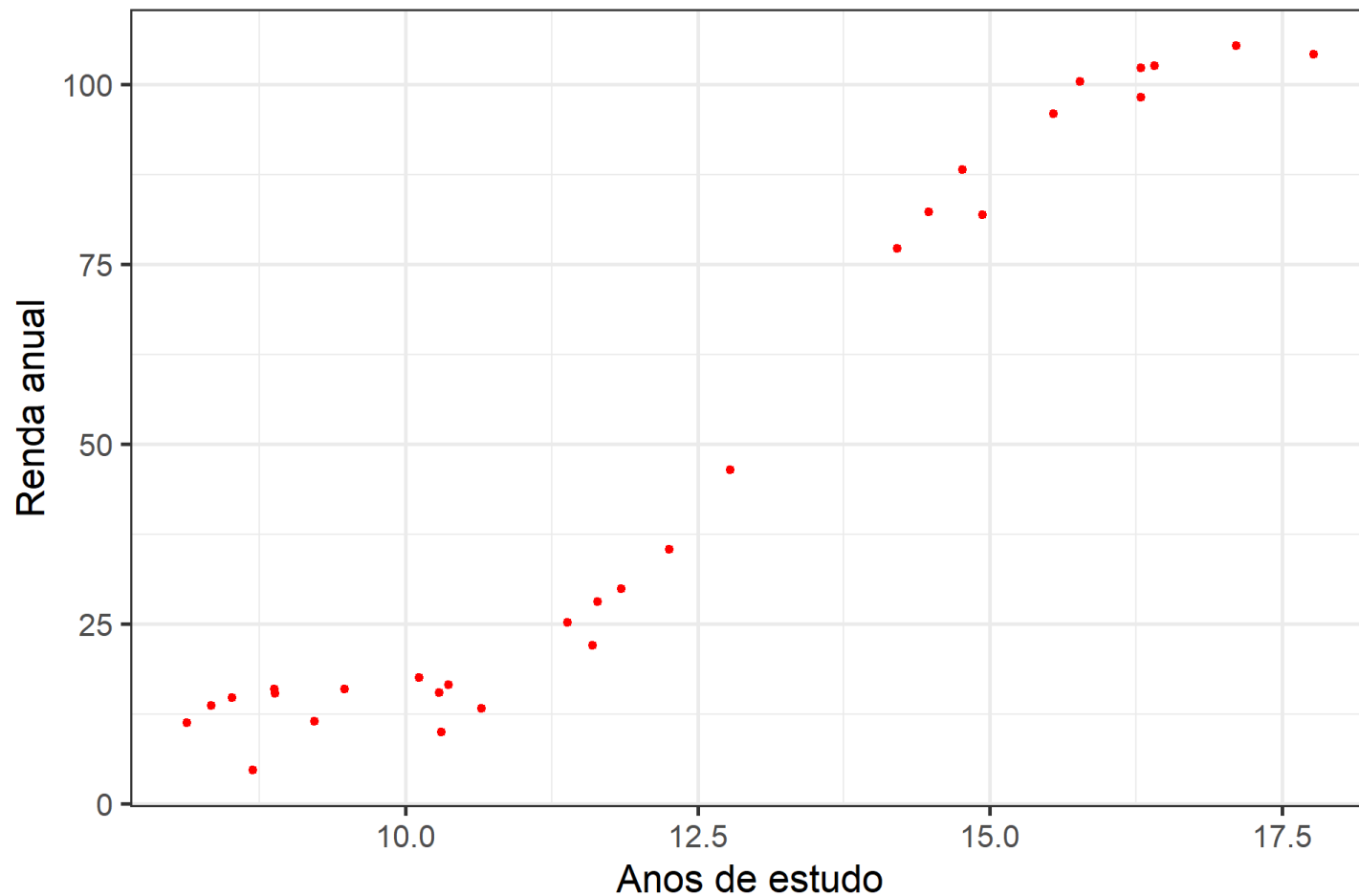
valor_y <- 45*tanh(valor_x/1.9 - 7) + 57 + rnorm(n = n_obs, mean =

dados <- tibble(x = valor_x,
                 y = valor_y)

dados %>%
  ggplot(aes(x, y)) +
  geom_point()
```

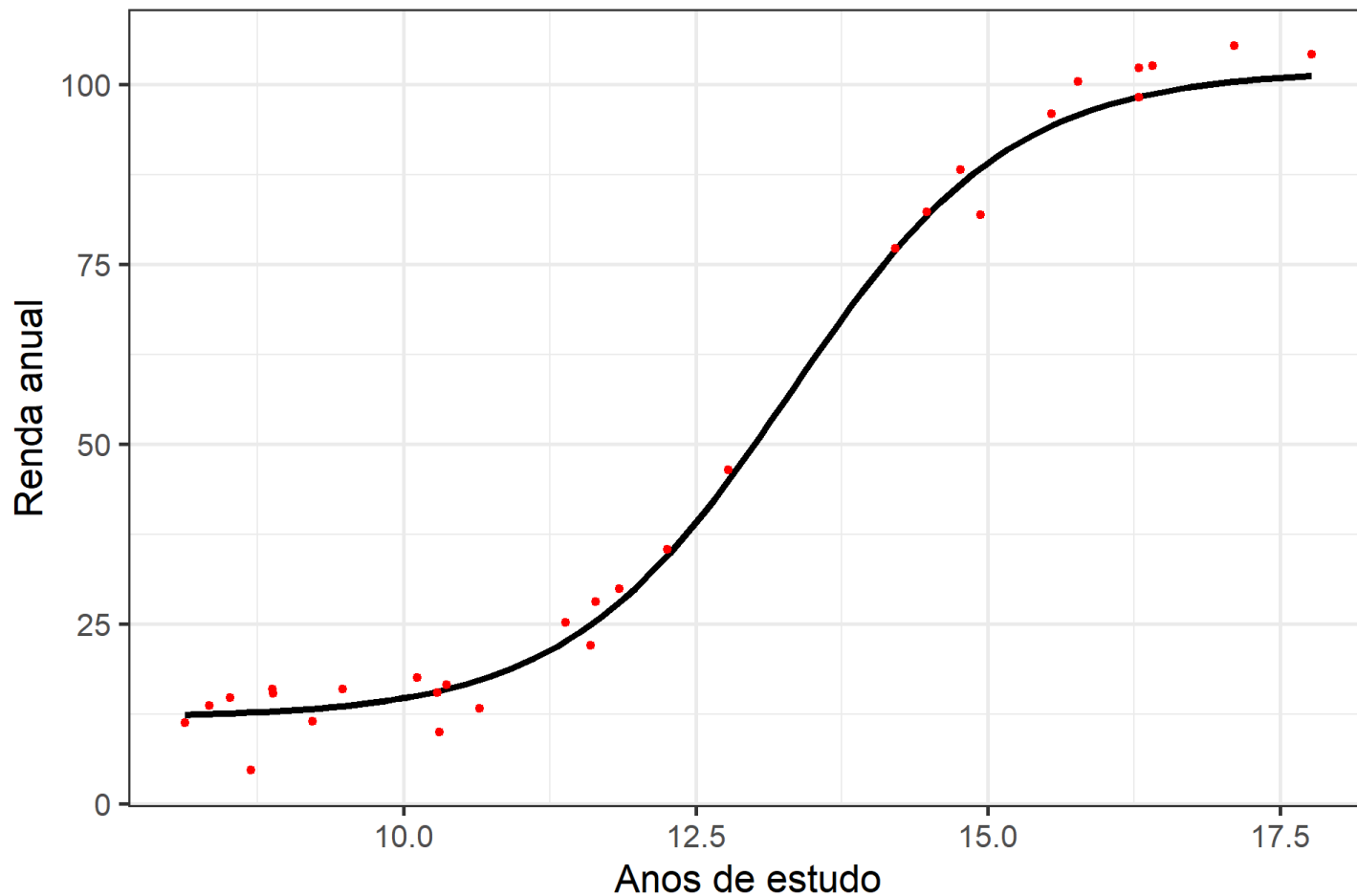
Dados gerados

Veja abaixo uma amostra de 30 "pessoas" com anos de estudo e salário anual (x_i, y_i) gerados de acordo com a definição anterior.

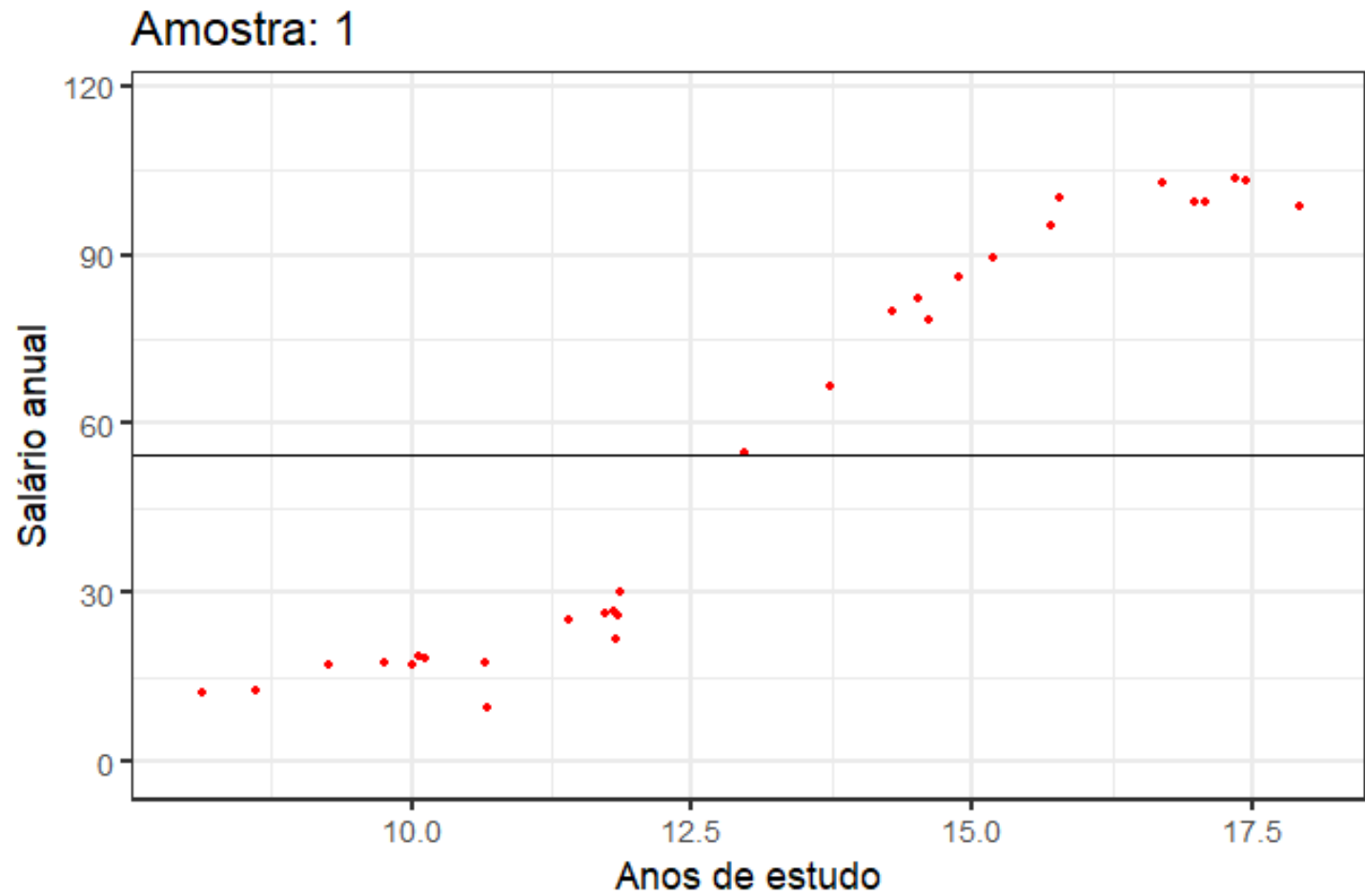


Dados gerados

Veja abaixo uma amostra de 30 "pessoas" com anos de estudo e salário anual (x_i, y_i) gerados de acordo com a definição anterior.

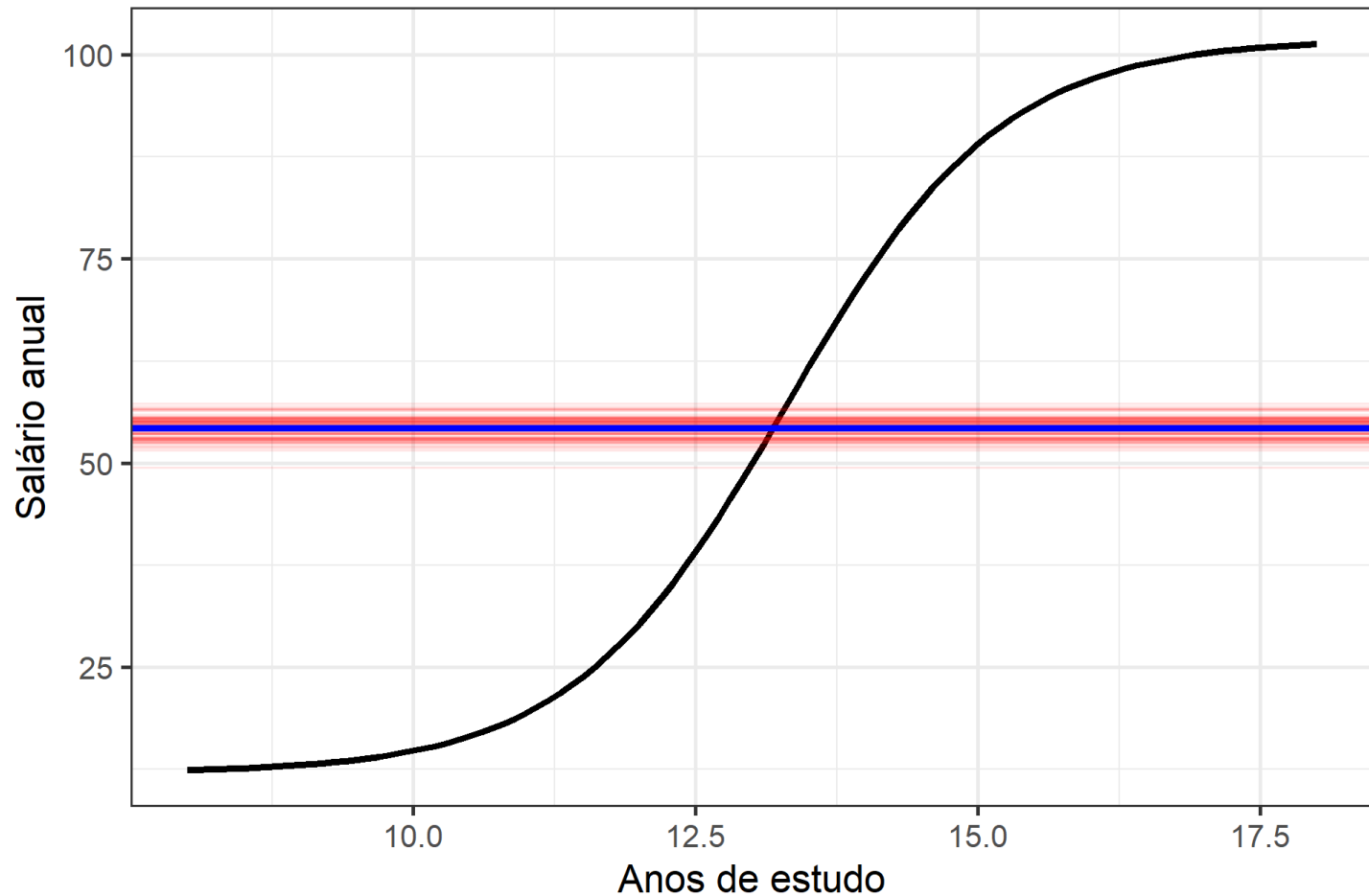


Várias amostras



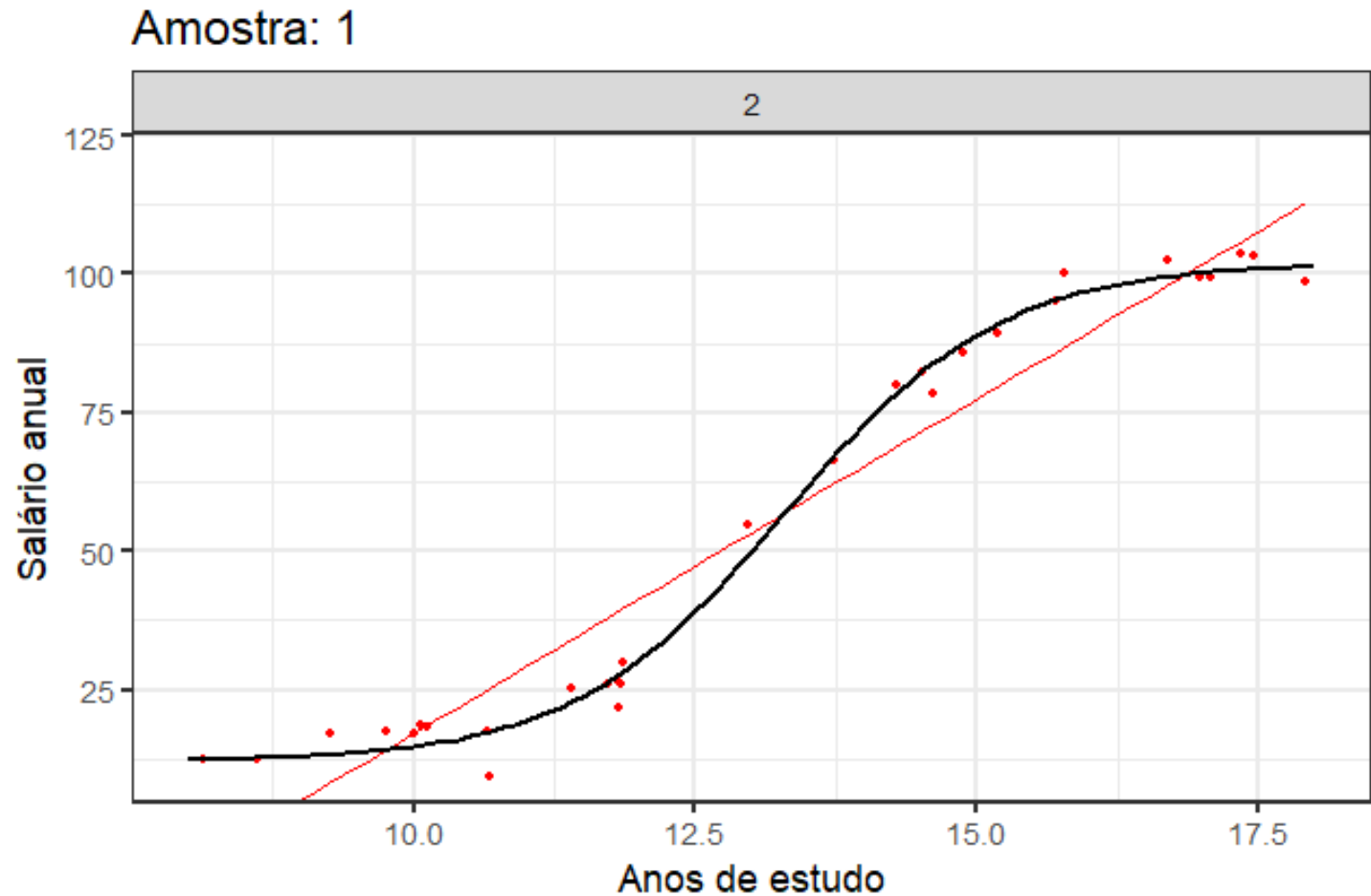
Modelo médio

Considerando os 100 conjuntos de dados gerados e $\hat{f}(x) = \frac{1}{30} \sum_{i=1}^{30} Y_i$.



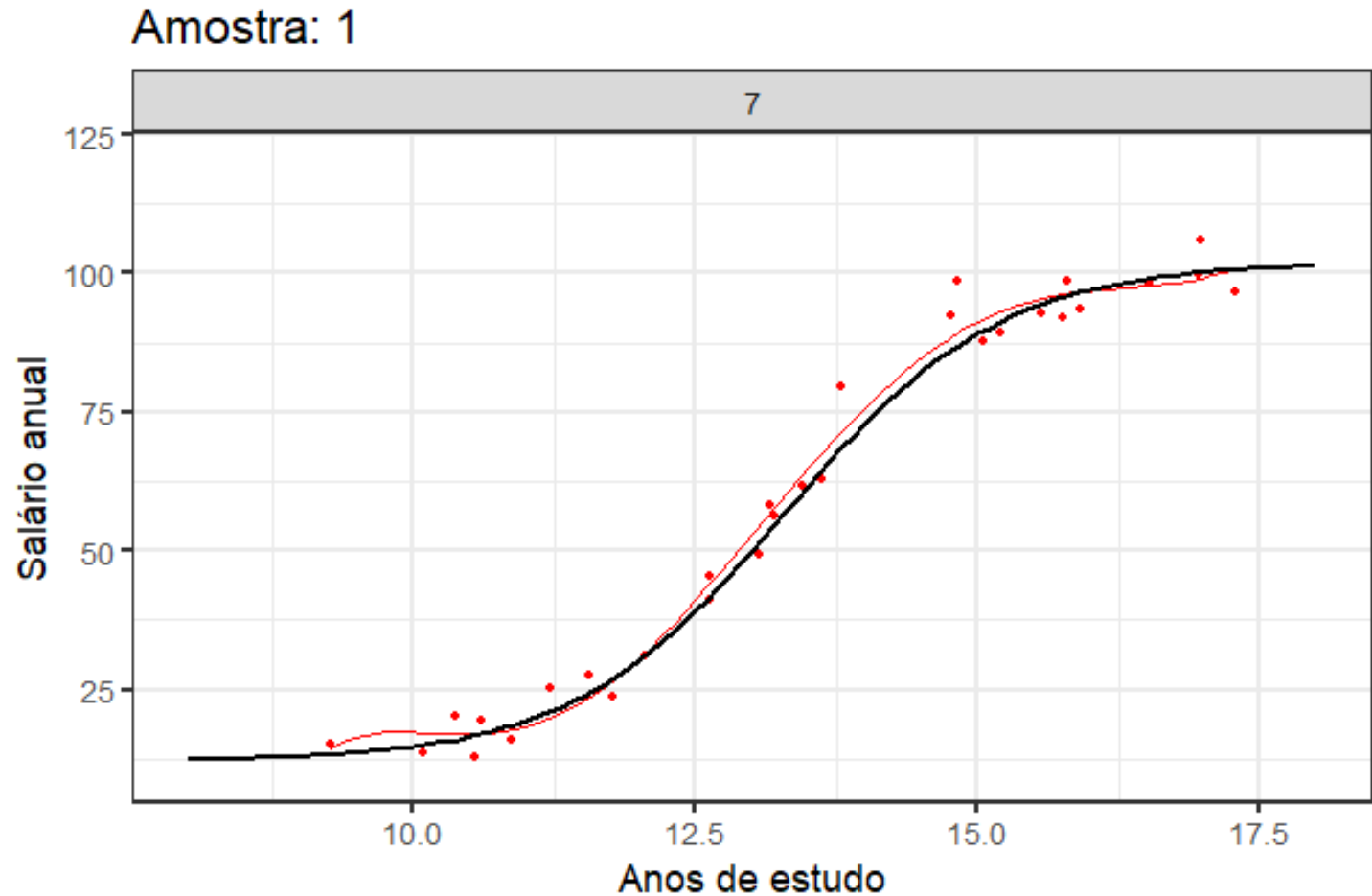
Modelos mais flexíveis

Considerando 100 modelos com 2 graus de liberdade.



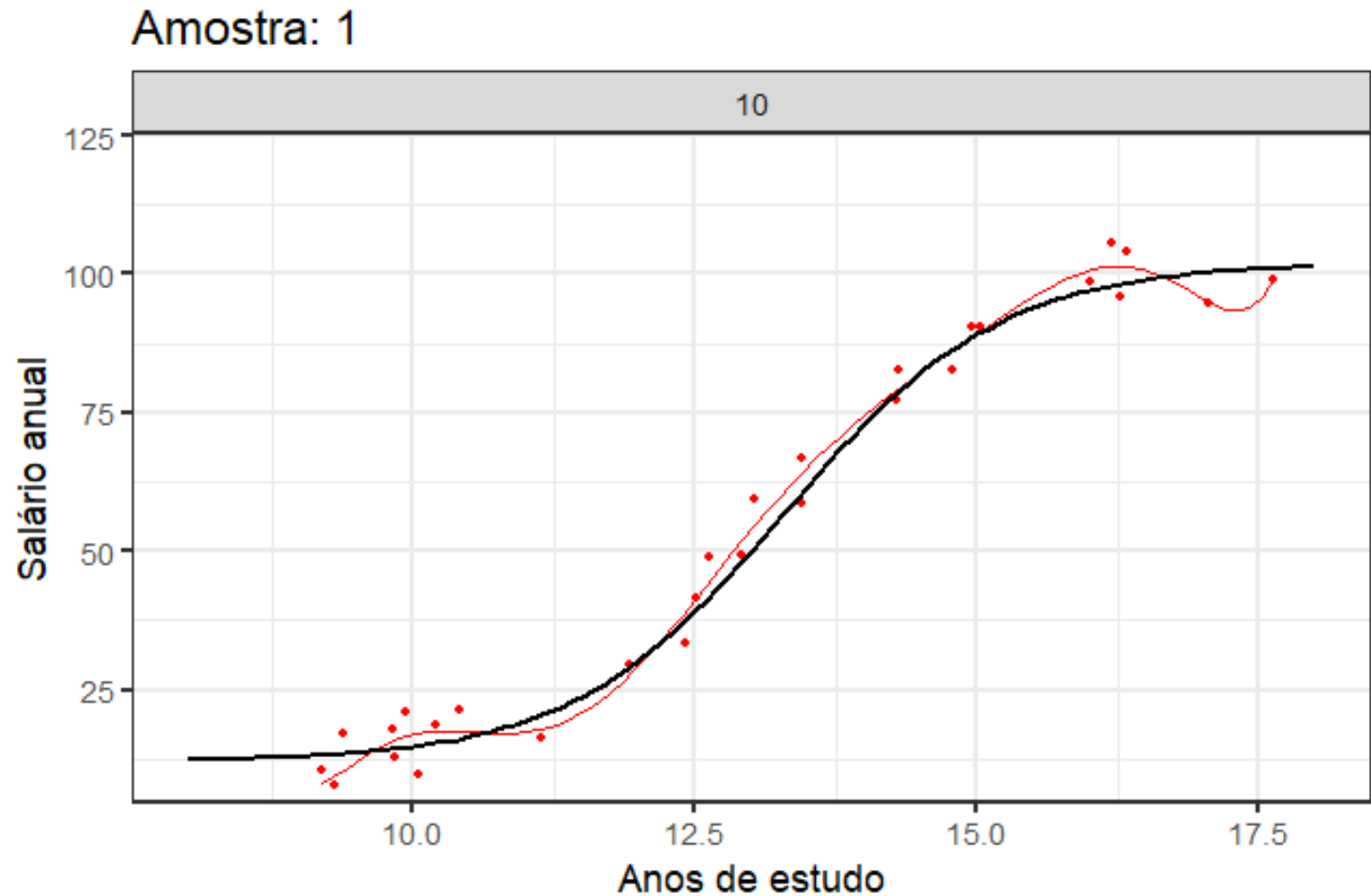
Modelos mais flexíveis

Considerando 100 modelos com 7 graus de liberdade.



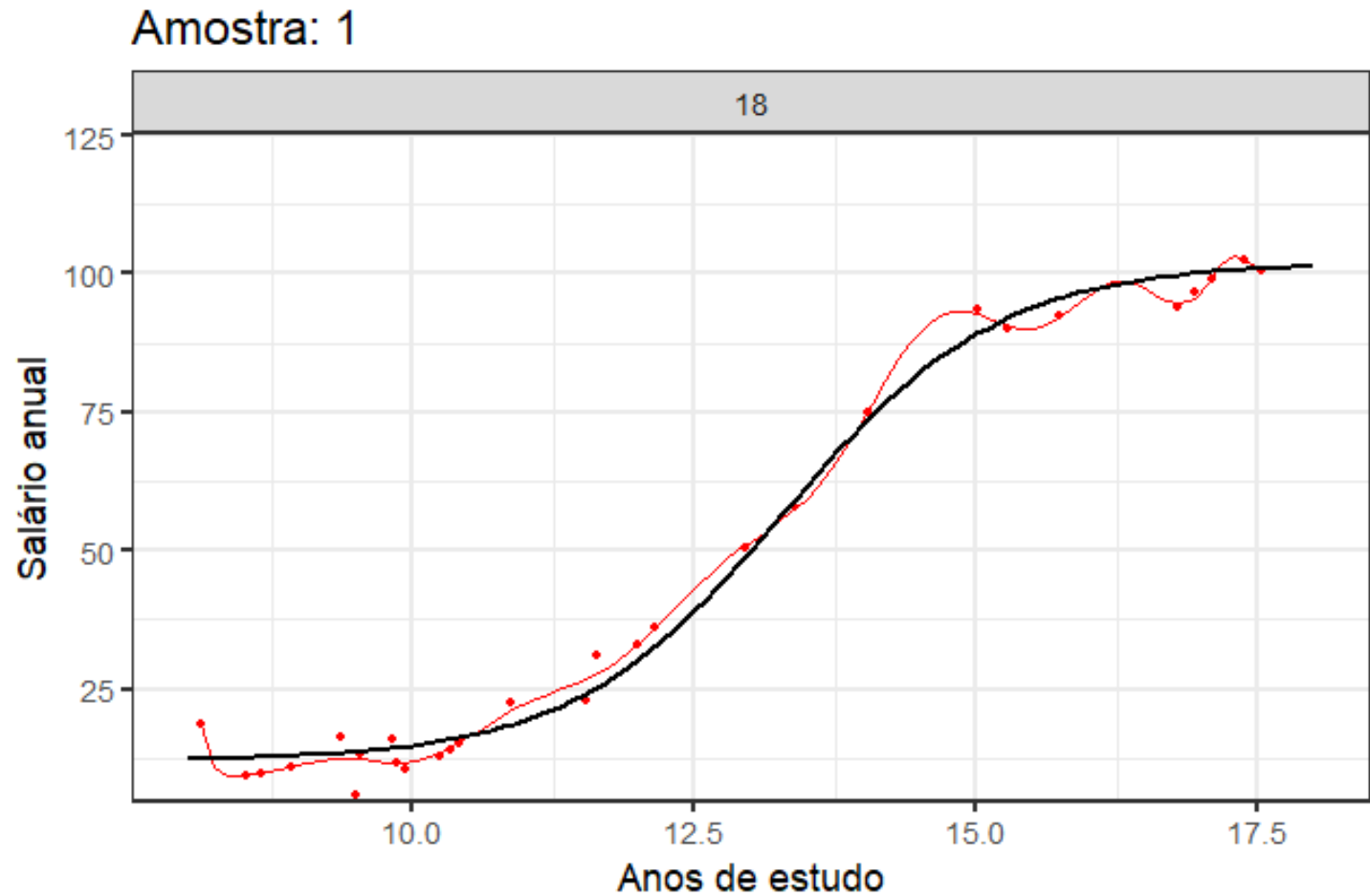
Modelos mais flexíveis

Considerando 100 modelos com 10 graus de liberdade.

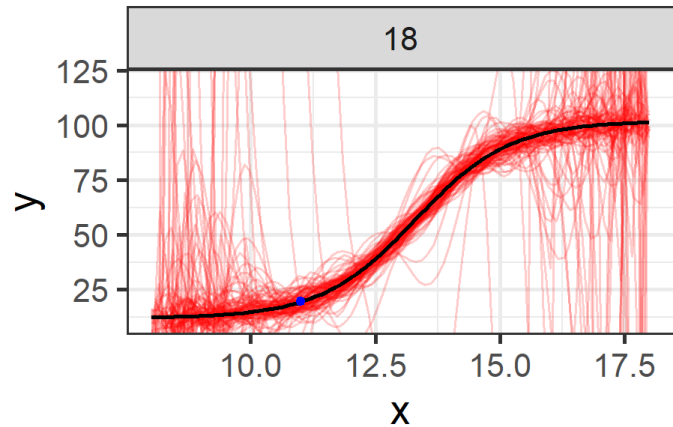
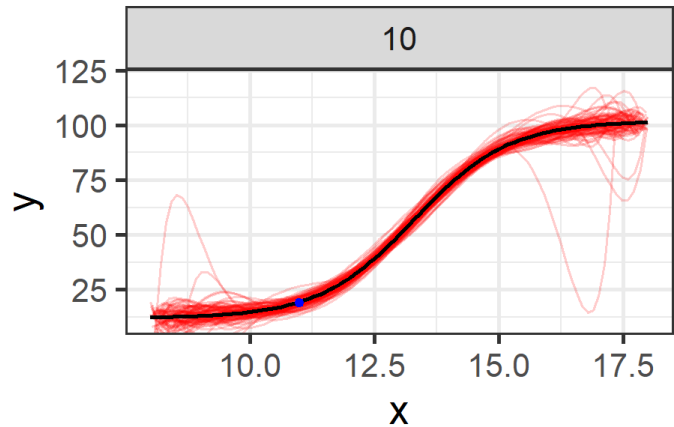
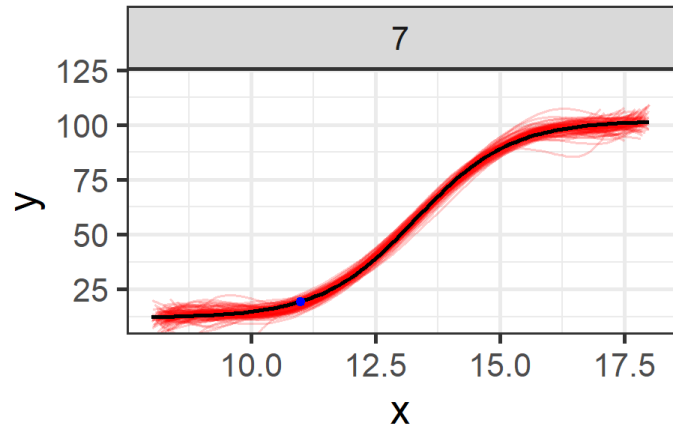
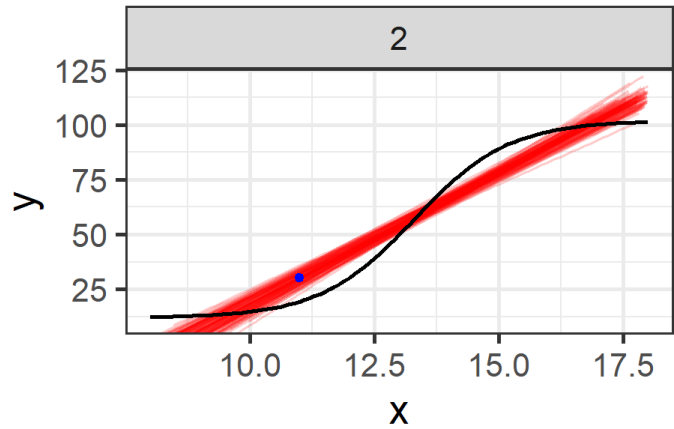


Modelos mais flexíveis

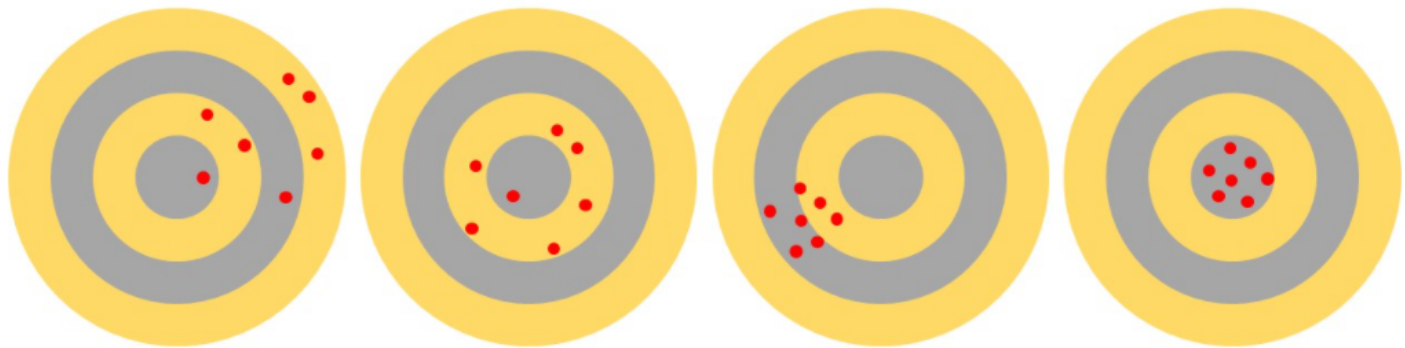
Considerando 100 modelos com 18 graus de liberdade.



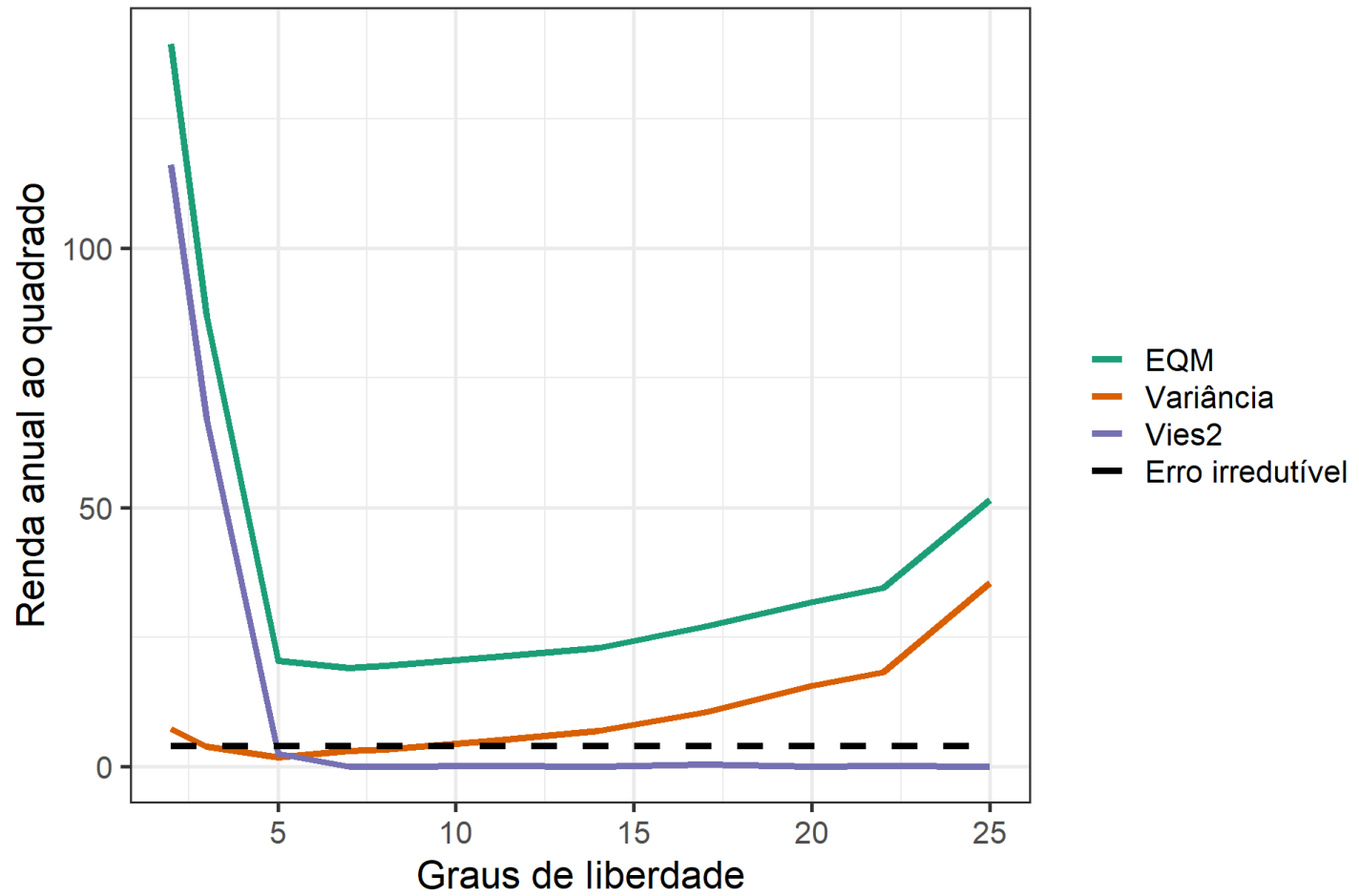
Modelos mais flexíveis



Qual a relação desta figura com o slide anterior?



Trade-off viés e variância

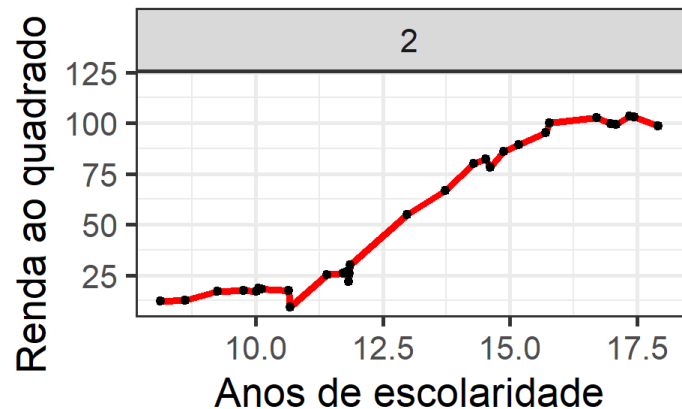
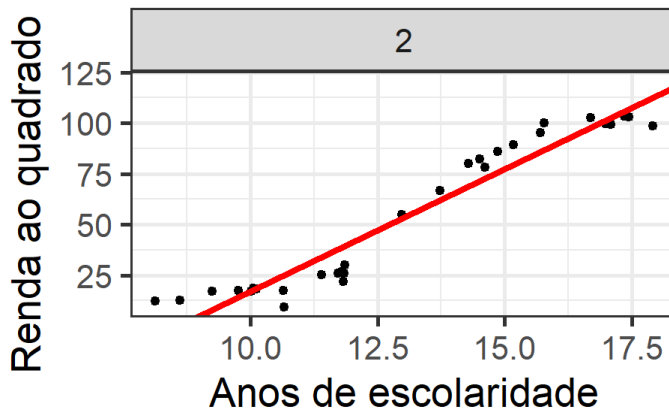


Problema

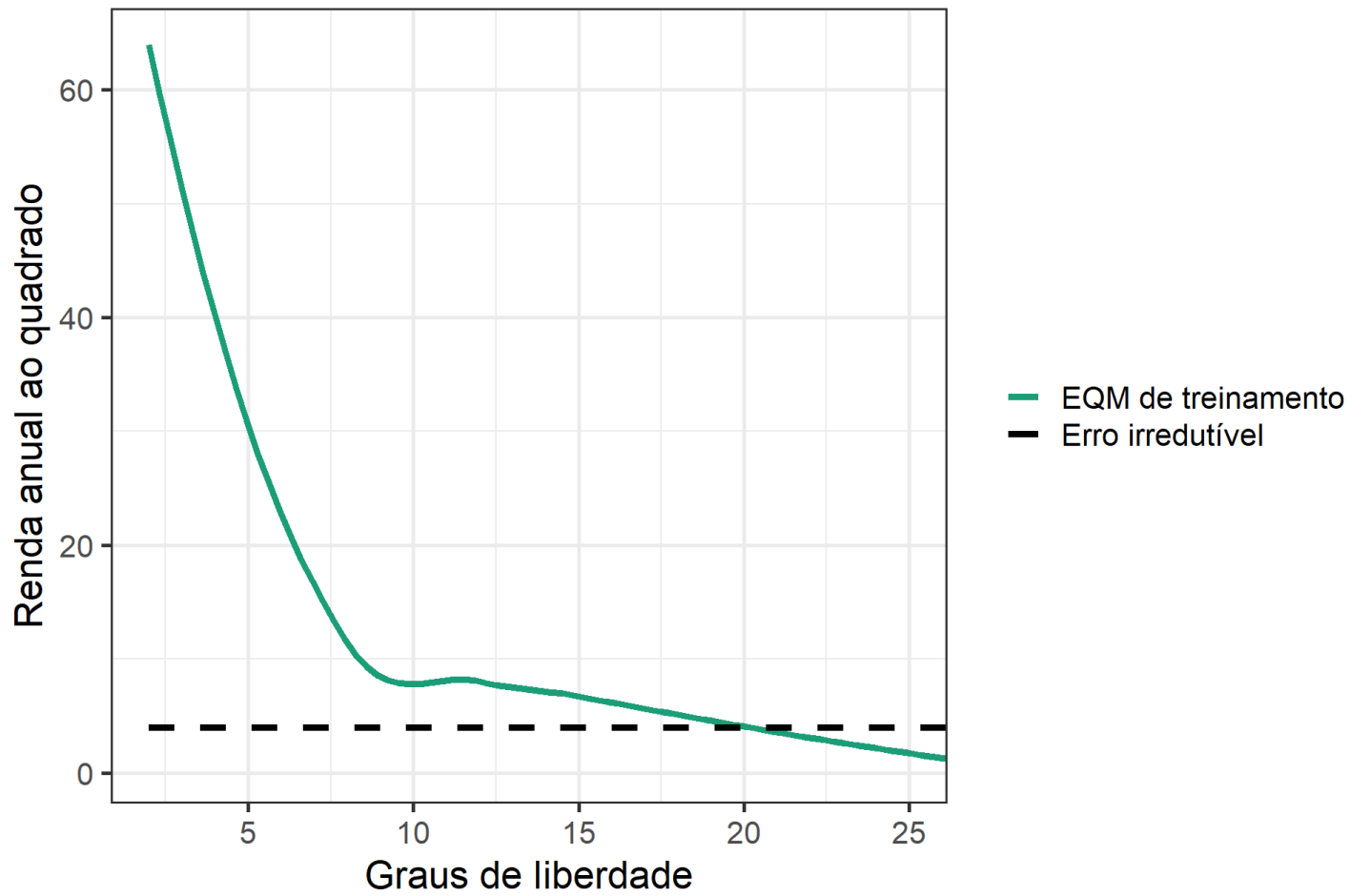
- Na prática, não conhecemos a função $f(\cdot)$!
- Como estimar o erro de predição $(f(x_i) - \hat{f}(x_i))^2$?
- Alternativa: considerar a diferença $(y_i - \hat{f}(x_i))^2$

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{f}(x_i))^2.$$

- Mas existe um problema!



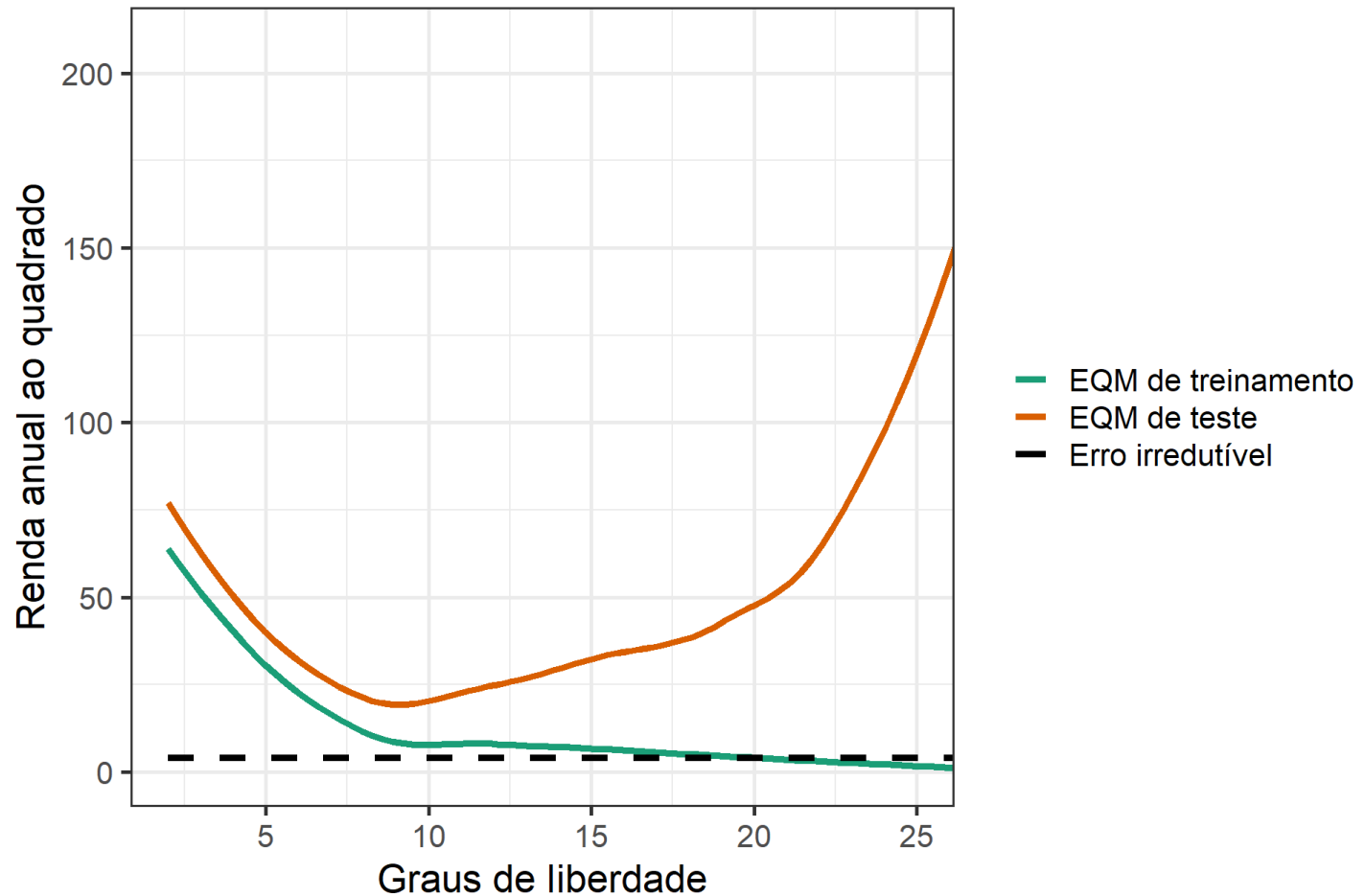
Erro quadrático médio de treinamento



O que fazer se não houver conjunto de teste?

- **MSE de teste**: calculado com dados que **não** pertencem ao conjunto de treinamento.
- Essa métrica é utilizada na seleção de modelos.
- Na prática não há um conjunto de teste disponível.
- Alternativas:
 - *Validation set approach*;
 - *Cross validation*;
 - *Bootstrap*;
 - → assunto das próximas aulas!

Erro quadrático médio de treinamento e de teste



Resumindo...

- Definição de variável resposta Y e variáveis preditoras $X = (X_1, \dots, X_p)$.
- Quando Y é quantitativa, dizemos estar tratando de um problema de **regressão**.
- Modelo: $Y = f(X) + \epsilon$, f é desconhecida.
- Queremos estimar f para fazer **inferência** ou **predição**.
- Estimativa de f : \hat{f} .
- O erro de \hat{f} pode ser decomposto em
 - erro **redutível**: $[f(X) - \hat{f}(X)]^2$,
 - erro **irredutível**: $\text{Var}(\epsilon)$.
- Relação entre interpretabilidade e flexibilidade.
- Qualidade de um ajuste pode ser avaliada através do $\text{MSE} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{f}(x_i))^2$.
- *Trade-off* entre viés e variância: $\text{MSE}[\hat{f}(x)] = \text{Vies}^2[\hat{f}(x)] + \text{Var}[\hat{f}(x)]$.
- Performance do modelo deve ser avaliada no conjunto de **teste**.

Referências

An Introduction to Statistical Learning: with Applications in R. James, G. and Witten, D. and Hastie, T. and Tibshirani, R. 2013.

Notas de aulas prof. Tiago Mendonça. Curso PADS Modelos Preditivos.

Obrigado!

`magnotfs@insper.edu.br`